



TITLE:

層状超伝導体の平行磁場での渦糸構造(Dissertation_全文)

AUTHOR(S):

市岡, 優典

CITATION:

市岡, 優典. 層状超伝導体の平行磁場での渦糸構造. 京都大学, 1996, 博士(理学)

ISSUE DATE:

1996-01-23

URL:

<https://doi.org/10.11501/3108330>

RIGHT:

新 制
理
932
京大附図

学 位 申 請 論 文

市 岡 優 典

学位申請論文

層状超伝導体の平行磁場での 渦糸構造

市岡 優典

平成7年 11月

アブストラクト

層状超伝導体において 平行磁場をかけた場合には 超伝導層の層と層の間の領域を渦糸の中心が通過するという状況が実現している。本研究では $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ を想定した物質パラメータを用いて、このような平行磁場の状況における 渦糸の具体的な構造 および その渦糸のまわりにできる低エネルギーの準粒子励起状態を 数値緩和法を用いて 計算する。

平行磁場での渦糸構造に関しては、孤立した渦糸の場合と渦糸格子の両方の場合について、Lawrence-Doniach 理論のフリーエネルギーを最小にする状態を数値的に求めることにより、渦糸のまわりでのペアポテンシャルの構造を具体的に計算する。平行磁場での渦糸格子については、その単位格子の層に垂直方向の長さが層間隔の整数倍でないといけなという制約があり、磁場が変化すると、渦糸格子の層に垂直な方向の周期が異なる格子構造の間での 一次転移が起こると期待される。そこでフリーエネルギーを評価することにより、この一次転移の具体的評価を行ない、また 磁化の磁場依存性を計算する。その結果、この磁化曲線は あまり磁場が強くない時は $H^{-1/2}$ でプロットすると一次転移による周期的な振動が見られるが、磁場が強くなるとこの周期的な振動いからのずれが見られるという結果が得られる。

準粒子励起については 孤立渦糸の場合に Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値緩和法で解くことにより、最低のエネルギー準位の固有状態を求める。さらに上の準位の固有状態についてはすでに求めた下の準位の固有状態と直交するという条件の下で 同様の計算をして求める。こうして 下から 10 番目までの準位の 固有状態の 固有エネルギーおよびその波動関数を具体的に求めた。その結果、平行磁場の場合にも その渦糸のまわりには束縛された準粒子励起状態が存在すること、ただし、最低の励起エネルギーの大きさは 垂直磁場の場合とは異なり、超伝導エネルギーギャップのオーダーの値であることがわかった。なお、今後は 渦糸格子の場合や d 波超伝導の場合への拡張が期待されるが、この Bogoliubov-de Gennes 方程式による方法からのアプローチの可能性 およびその限界について 最後に考察する。

目次

1 序	3
2 孤立した渦糸の構造	7
2.1 はじめに	7
2.2 数値緩和法による計算	7
2.3 ペアポテンシャルのようす	8
3 渦糸格子の構造	9
3.1 はじめに	9
3.2 数値緩和法による計算	10
3.3 ペアポテンシャルのようす	12
3.4 一次転移の評価 および 磁化の磁場依存性	13
3.5 実験結果との比較	16
4 孤立した渦糸のまわりでの 束縛された準粒子励起	18
4.1 はじめに	18
4.2 バルクの場合 および 層に垂直な磁場の場合	19
4.3 層に平行な磁場での 最低エネルギーの励起状態	21
4.4 層に平行な磁場での さらに上のエネルギー準位の励起状態	25
4.5 d 波超伝導の場合	34
5 渦糸格子での準粒子励起	37
5.1 渦糸格子での Bogoliubov-de Gennes 方程式	37
5.2 平行磁場の場合の数値計算の現状	39
5.3 バルクの場合での いくつかの考察	40
6 まとめ および 今後の展望	44
A 付録	47
A.1 バルクの場合の準粒子の固有状態の計算	47

1 序

酸化物高温超伝導体が発見されてから 10 年近くがたとうとしているが、この高温超伝導体については、超伝導転移温度が高いことに加え、超伝導の性質が従来型の超伝導とは大きく異なる点が多々あることがわかり、これらの解明のため、超伝導の研究が再び大きく注目されるところとなった。これらの物質の特徴としては、電子状態は 2 次元性が強いこと、電子間相互作用が大きい強相関電子系であること、超伝導オーダーパラメーターの対称性が (まだ議論の余地は残されているが) s 波でなく $d_{x^2-y^2}$ 波である可能性が大きいことなどがあり、これらに着目して引力の起源や ノーマル相や超伝導相での特異な振舞いについて調べられてきた。また、混合状態においては、高温超伝導体では、コヒーレンス長が非常に短いこと、準 2 次元的事実であることに起因して、超伝導揺らぎが非常に重要な役割を果たしていることなどが調べられてきた。

さて、本稿で注目して調べるのは、混合状態での渦糸の構造についてであり、磁束融解曲線より低温側の渦糸格子状態での静的な性質に着目して研究を行なう。従来型の超伝導体においては物質は均質であると考えて良く、たとえ異方性があったとしても、各方向のコヒーレンス長で適当なスケール変換を行えば、1 本の渦糸の場合には円筒対称な構造であり、渦糸格子を形成した場合には正三角形の格子となるとして扱って良かった。しかしながら、高温超伝導体の場合にはこれらのことが必ずしも正しくない状況にある。それは

- 超伝導オーダーパラメーターが $d_{x^2-y^2}$ 波の対称性を持つこと。
- 層状超伝導体であること。

による。前者の点に着目した場合を考えると、超伝導オーダーパラメーターは $d_{x^2-y^2}$ 波であるのでもともと 4 回対称な対称性を持つ異方的な超伝導であるわけだが、孤立した渦糸構造にもこの事実が反映する。従来の s 波超伝導の場合には円筒対称な渦糸構造だったものが、 $d_{x^2-y^2}$ 波超伝導ではこの対称性が自発的に破れ、4 回対称な渦糸構造となる。この構造は Eilenberger 方程式による準古典的な計算で確かめられている [1]。また、この事実と、 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO) で観測されている正三角形からゆがんだ形の格子構造 [2] との関連も注目されている。これらの点も興味深く大切な問題であるが、これらの点の詳細な議論は別の機会に譲ることにし、本稿では後者の層状超伝導体であることに起因する特異な性質について述べることにする。

層状超伝導体とは、層状構造を持つ物質の超伝導体でしかも層に垂直方向のコヒーレンス長が層間隔よりも短いような場合のものを言う。このような場合には 2 次元超伝導体が層状に積み重なっており隣合った超伝導層の間にはジョセフソンの結合があるというモデルで考えるのが適当である。そして、このような層状超伝導体のモデルを考える時には Lawrence-Doniach 理論のフリーエネルギーの表式が出発点として用いられる。この理論は超伝導層を GL 方程

式で考え、かつ、隣合った層間でクーバー対がジョセフソン・トンネリングするとして考えるものである。Bulaevskiiによって示されたように[3]、Lawrence-Doniach理論の式は、層内については2次元電子系で層内でのみ引力がはたらくとしtight-binding近似の電子の層間とび移りとして層間結合を導入した電子系のモデルで、層間結合が弱いとした場合に導出できる。酸化物高温超伝導体のうち、YBCOでは、層に垂直方向と平行方向のコヒーレンス長の異方性の比は $\gamma = \xi_{\parallel}/\xi_{\perp} = 5 \sim 8$ 、層間隔と層に垂直方向のコヒーレンス長の比は $s/\xi_{\perp} = 2.5 \sim 4$ であり、層状超伝導体として扱うべきパラメーターである。このYBCOが最も実験の進んでいる物質なので本研究で具体的な数値計算をする場合の物質パラメーターはYBCOに相当する値を用いて行なうものとする。なお、Bi系ではさらに異方性が大きく $\gamma \sim 55$, $s/\xi_{\perp} \sim 45$ であり、Tl系ではもっと異方性が大きくこれらの数字はもう一桁大きい。Bi系やTl系では層間結合が弱い極限と考えて良く、この場合にはペアポテンシャルの振幅は層内のすべての場所で一定値であると考える良い。

層状超伝導体において、磁場を層に平行または平行に近い角度でかけた場合には、特に層構造の役割が重要になってくる。これらの場合には、3次元非等方のLondon理論やGinzburg-Landau(GL)理論のような均質な物質を想定した理論ではだめで、Lawrence-Doniach理論のように層間のジョセフソンの結合を考慮に入れた理論を用いる必要がある。層に平行な(またはそれに近い角度の)磁場の場合にできる渦糸の中心線は超伝導層と超伝導層のちょうど中間を通過するほうが、超伝導層内を渦糸芯が通過する場合に比べ、磁場によるペアポテンシャルの抑制が小さく、よって、エネルギー的に得である。Klemm, Luther, Beasleyによって示されたように[4]、このような状況下では、磁場によって超伝導が壊れにくくなり、上部臨界磁場も非常に大きくなる。

層状超伝導体で層に平行な(またはそれに近い角度の)磁場の場合の渦糸構造については、層間のジョセフソンの結合があるために、扱う表式が複雑な形になり、よって、解析的な計算は非常に困難になる。現状では、層間結合の弱い極限として考えてLondon近似でペアポテンシャルの振幅を一定と近似し、渦糸のエネルギーなどを導出するという方法がとられているが[5]、いささか、概念が先行し計算が追いつけないでいるという感じを受けないでもない。

本研究での計算方針はLawrence-Doniach理論から数値計算によって具体的に渦糸構造を決定するというものである。計算手法としては数値緩和法を用いる。この計算方法は各座標点において、フリーエネルギーをオーダーパラメーターで変分した値を見てその場所でのオーダーパラメーターの値を修正するという単純な方法であるが、今の渦糸構造の場合のように、フリーエネルギー汎関数が準安定状態を持たず、フリーエネルギー最小の状態が唯一で、かつ、容易に到達できる状況の問題ではこの方法は非常に有効である。また、この数値的な計算手法では、ペアポテンシャルの振幅については一定値と近似する必要はなく、その自由度も残した上で計算できる。そのため、YBCOのように層状超伝導体ではあるが、層結合が必ずしも非常

に弱いとは言えず、ペアポテンシャルの振幅を一定値に近似することが必ずしも正しくない物質の場合にも計算が行なえる。また、温度が上がるなどして、層に垂直方向のコヒーレンス長が伸びて層間隔より長くなるような状況では 2 次元的な振舞いから 3 次元的な振舞いへのクロスオーバーが期待できるが、このときもまた、ペアポテンシャルの振幅の自由度を残した計算が必要である。また、この計算手法では、磁化などの物理量の振舞いも具体的に計算でき、これにより、Lawrence-Doniach 理論から予測される物理量の振舞いが実験データと比較可能な形で提供できる。そこで、今後、精密な実験がされ、この計算結果との比較が行なわれることにより、Lawrence-Doniach 理論の妥当性も含めて、層状超伝導体の理解が進むことが期待される。なお、数値緩和法で層に平行磁場の場合の渦糸格子の具体的構造を決定するという計算は我々が初めてである。

渦糸のまわりでの準粒子励起状態については、Bogoliubov-de Gennes 方程式を渦糸が存在する場合について解いて、その固有状態を求めれば良い。バルクで孤立した渦糸の場合には Caroli, de Gennes, Matricon によって解析的な解が得られており、渦糸のまわりに束縛状態が存在することが示されている [6]。このうち、渦糸芯での低エネルギーの励起のエネルギー固有値は $\mu\Delta_0^2/E_F$ ($\mu = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \dots$) の形で与えられる。(Δ_0 は 磁場のない時のエネルギーギャップの大きさ、 E_F は フェルミエネルギー。) ここで、 μ は波動関数の位相の渦糸のまわりでの巻き数に関係したパラメーターで、エネルギー準位を指定する量子数の役割をしている。この渦糸のまわりでの準粒子励起の束縛状態は Hess らによる NbSe₂ での走査型トンネル顕微鏡の実験で実際に観測されてさらに注目されることとなった [7]。

さて、層状超伝導体においても層に垂直な磁場の場合には Caroli らの計算が適用できるが、層に平行な磁場の場合には状況が一変する。平行な磁場の場合には、渦糸の中心線が超伝導層の層と層のちょうど中間の位置を通る渦糸の構造となり、このペアポテンシャルの構造を計算するためには、層間での電子のとび移りを考慮しなければならない。このような状況下では、Caroli らのように円筒対称を仮定した議論はできない。そこで、今の場合には解析的な取り扱いはいきなり、数値的に準粒子励起状態を求めることにする。用いる手法はここでも数値緩和法を用い、エネルギー固有値の 2 乗の期待値を最小にするように緩和させることにより、最低エネルギーの固有エネルギーとその波動関数を求める。また、平行な磁場の場合には渦糸のまわりをまわる経路には層間結合が存在するため、渦糸のまわりでの波動関数の位相の巻き数ははっきり定義できなくなる。よって、エネルギー固有値を指定する量子数 μ は平行な磁場の場合には使えない。そこで、さらに上のエネルギー準位の固有状態を求めるためには、すでに求めたエネルギー準位の波動関数と直交するという条件をはたして、同様の数値緩和法の計算を行なうという手法を用いる。なお、層状超伝導体での平行磁場の場合の準粒子励起を考えるという試み、Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値緩和法で解こうという試みは我々が初めてである。

続いて、渦糸格子の場合の準粒子励起が問題になるわけであるが、これについては、今のところ、うまく結果が得られていない。しかし、これは層に平行な磁場の場合に限ったことではなく、バルクの場合でも渦糸格子での準粒子励起については具体的な解は未だに求まっていないのが現状である。この困難の原因は、電子は電荷が $-|e|$ 、クーバー対は電荷は $-2|e|$ であることに起因して、準粒子を考える時には、ペアポテンシャルを考える時の単位格子の2つ分を一つの単位格子として考えないといけないという事実によっている。また、隣の単位格子での波動関数と連続的につながることを要請すると、波動関数の位相の渦糸のまわりでの巻き数によってエネルギー準位を指定するという概念も修正をせまられる状況にある。

酸化物高温超伝導体に関連しては、 d 波超伝導の場合の渦糸のまわりでの準粒子励起が注目されている。しかし、Bogoliubov-de Gennes 方程式で d 波超伝導の場合を考えると、準古典近似した場合、表式が複雑な形になるため、この方法では扱いが困難となる。超伝導の対称性は2電子あってはじめていえる性質であるが、Bogoliubov-de Gennes 方程式では一体の波動関数で考えるため、 d 波超伝導を考える場合には計算が簡単でなくなっているのだといえる。ちなみに Eilenberger 方程式による方法では2体のグリーン関数で考えるためこのような困難はなく比較的楽に渦糸構造が求められる [1]。

本稿は、第1節の序に続き、第2, 第3節では Lawrence-Doniach 理論を出発点にした渦糸構造の計算とその結果について記述する。第2節は孤立した渦糸の場合であり、第3節は渦糸格子の場合についてである。渦糸格子の場合には磁場が変化した時の異なる周期の格子構造の間での一次転移についても考察し、磁化の磁場依存性についても計算を行なう。第4, 第5節では、第2, 第3節で計算されたペアポテンシャルでの渦糸のまわりの準粒子励起についての計算を述べる。第4節は孤立した渦糸の場合であり、下から10番目までの準位の励起状態を計算し、束縛状態が存在することを示す。また、 d 波超伝導の準粒子励起を考える場合についても言及する。第5節は渦糸格子の場合であるが、この場合は困難があつて計算結果は得られていない。そこでこの困難の原因について述べる。この困難は平行磁場の場合だけでなく、従来から研究対象になっているバルクの場合にも存在する問題である。最後の第6節はまとめと今後の展望について述べる。なお、第2節と第4節の内容は 恒藤敏彦教授との共著の Journal of Low Temperature Physics 96, 213 (1994), "Excitations bound to a vortex line in layered superconductors" [8] として、第3節の内容は 拙著の Physical Review B 51, 9423 (1995), "Vortex Lattice of Layered Superconductors in Parallel Magnetic Fields" [9] として論文発表したものをもとにしている。

2 孤立した渦糸の構造

2.1 はじめに

この節では まず 層状超伝導体で平行に磁場がかけられた時にできる渦糸一本の場合についての渦糸構造を考察する。渦糸の中心が超伝導層の中を通過するとすると、その通過する地点のまわりでは超伝導ペアポテンシャルが抑制され、特に 中心線の場所では ペアポテンシャルの振幅は0にならなければならない。しかし、平行磁場の場合は、渦糸の中心が 超伝導層と超伝導層の間の中間領域を通過することが可能である。この場合、渦糸の中心が超伝導層の外にあるので 磁場によるペアポテンシャルの抑制が小さくなる。当然、2つの超伝導層のちょうど中間を 渦糸の中心が通過する状態がフリーエネルギー最小の状態であり、実際の渦糸はそのような構造になっていると考えられる。ただし、超伝導層の間にはジョセフソンの結合があって、渦糸のまわりでは層間ジョセフソン電流が流れ 渦糸芯の磁場を遮蔽しようとする。この遮蔽電流が流れる分だけペアポテンシャルが抑制されるが、このジョセフソン電流による遮蔽電流は バルクの場合に比べ 小さいのでペアポテンシャルが抑制は小さくなる。しかし 遮蔽電流が小さい分、遮蔽電流の流れる領域は バルクに比べ広い領域が必要で、ペアポテンシャルの渦糸芯の領域は層に平行方向のコヒーレンス長より 大きくなっている。本節の目的は、層状超伝導体で 平行に磁場をかけた場合のペアポテンシャルの形状を具体的に求め、渦糸のまわりではペアポテンシャルの振幅はどこまで下がるか？また、ペアポテンシャルの抑制が見られる渦糸芯の領域は どの程度広がっているのかを見ることにある。計算方法としては、層状超伝導体のモデルとして Lawrence-Doniach 理論での フリーエネルギーの表式を用い、数値緩和法で フリーエネルギー最小の状態を求めることにより、渦糸のまわりのペアポテンシャルの広がりの様子を得るという方法を用いる。

2.2 数値緩和法による計算

層状超伝導体の Lawrence-Doniach 理論での フリーエネルギー汎関数 F を各点でのペアポテンシャルで変分して得られる式 (GL 方程式) は 無次元化された形で 次のように与えられる。

$$\frac{\partial F}{\partial \psi^*(x, j)} = -\xi_{\parallel}^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi(x, j) - (\gamma s)^{-2} \left(\psi(x, j+1) + \psi(x, j-1) - 2\psi(x, j) \right) - \psi(x, j) + |\psi(x, j)|^2 \psi(x, j) = 0. \quad (2.1)$$

ここで $\psi(x, j)$ は j 番目の層の位置 x での ペアポテンシャルである。パラメーター $\gamma = \xi_{\parallel}/\xi_{\perp}$ は 層に平行方向と垂直方向のコヒーレンス長の異方性比であり、 s は 層間隔である。超伝導層の厚みは無視できるとする。長さは面内のコヒーレンス長を 1 とし ($\xi_{\parallel} = 1$)、 $\psi(x, j)$ の値は磁場がない時の値 Δ_0 を 1 とする。 y 軸は層に垂直方向に選び、 z 軸は渦糸線の方に選ぶ。渦糸線はまっすぐなものを考えているので、 $\psi(x, j)$ の z 依存性は無視できる。ここでは典型的な第

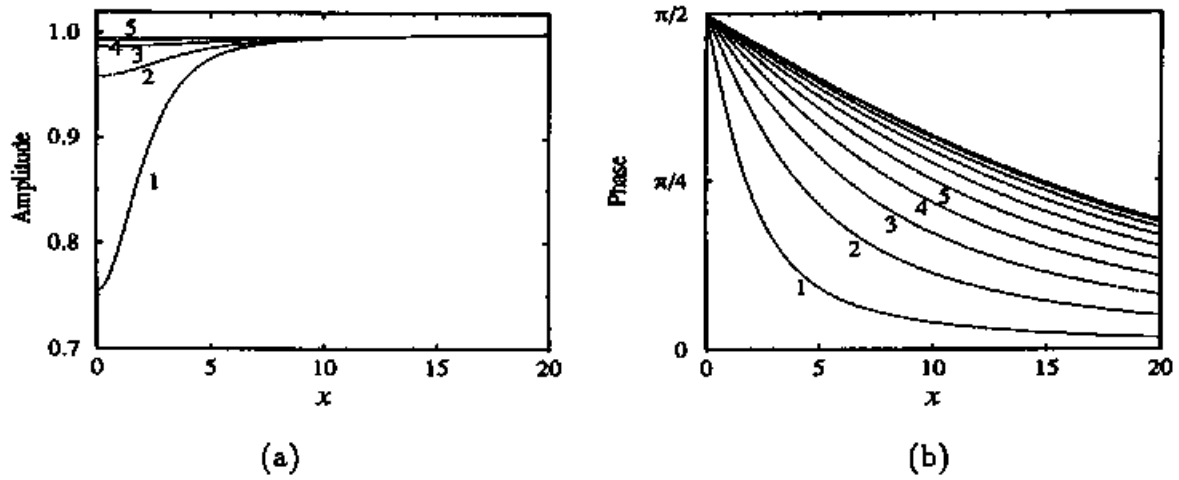


図 1: j 番目の層のペアポテンシャルの振幅 (a) と 位相 (b) ($j = 1, 2, \dots, 5$).

2 種超伝導体の孤立した渦糸を考えるので、単に 渦糸線のまわりを一周するとペアポテンシャルが 2π の位相を得るという条件をつければ良く、ベクトルポテンシャルの寄与は無視できる。Lawrence-Doniach 理論で フリーエネルギー最小の状態は 2 つの超伝導層の層と層のちょうど中間点を 渦糸の中心線が通る状態である [4]。そこで xy 面での原点は渦糸の中心に置くことにすると j 番目の層の y 座標は $y = (j - 1/2)s$ で与えられる。

具体的な ペアポテンシャルの形を得るため、GL 方程式 (2.1) を緩和法で数値的に解く。数値計算では 20 層 ($j = -9 \sim 10$) の $-40 \leq x \leq 40$ の領域を考え、 x については離散化して計算した。この領域の周囲の境界のところでは $|\psi| = 1$ とし 位相のみをフリーエネルギーが最小となるように変化させた。この領域の中の点では、緩和のステップ

$$\psi^{(new)}(x, j) = \psi(x, j) - c \frac{\partial F}{\partial \psi^*(x, j)} \quad (c: \text{定数}) \quad (2.2)$$

を繰り返し、フリーエネルギー最小の状態に収束させる。最終的には 各点での $\psi(x, j)$ がそれぞれ $|\partial F / \partial \psi^*(x, j)| < 10^{-10}$ の条件を満たす状態を得た。

2.3 ペアポテンシャルのようす

YBCO を想定して ジョセフソン長が $\gamma s = 2.5$ の場合を計算した。結果の ペアポテンシャルの振幅と位相を 図 1 に 示す。注目すべきは、最も渦糸の中心に近い層 ($j = 1$) においてもペアポテンシャルの振幅は 0.75 までしか下がっていないことで、これがバルクの場合や層に垂直な磁場の場合と大きく異なる点である。この振幅が下がっている渦糸芯の領域の広さは 面内のコヒーレンス長よりは大きくなっており、ジョセフソン長のオーダーとなっているが、これも 平行磁場の場合の特徴である。傾向としては、 γs の値が大きくなり層間結合が弱くなると、

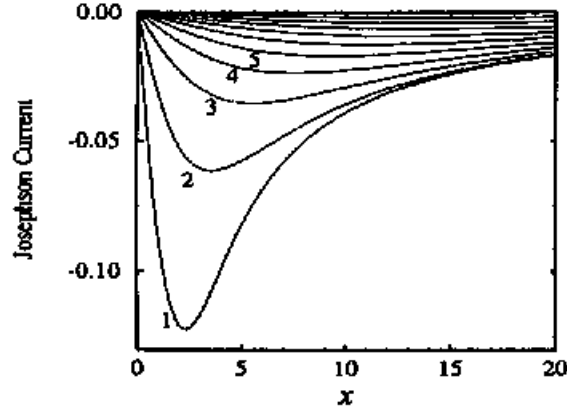


図 2: 層間を流れるジョセフソン電流密度: $J_{\psi}^{(j-1 \rightarrow j)}/(e\hbar|\Delta_0|^2/m)$. ($j = 1, 2, \dots, 10$.)

ペアポテンシャルの振幅の最小値は大きくなって 1 に近付き、振幅の変化する渦糸芯の領域は広くなる。

この構造のペアポテンシャルが渦糸のまわりの電流を運ぶ様子を見るために層間を流れるジョセフソン電流密度

$$J_{\psi}^{(j-1 \rightarrow j)}(x) = -\frac{e\hbar}{2ims^2\gamma^2} \left(\psi^*(x, j-1)\psi(x, j) - \psi(x, j-1)\psi^*(x, j) \right) \quad (2.3)$$

を計算した。この結果は図 2 に示しておく。渦糸をはさむ 2 層の間を流れるジョセフソン電流 ($j = 1$ の場合) は、渦糸の中心から 2.5 離れた地点で最大になっている。この 2.5 はジョセフソン長に相当している。

3 渦糸格子の構造

3.1 はじめに

この節では、前節に引続き層状超伝導体の平行磁場での渦糸構造を考えるが、この節ではもう少し磁場が大きくなって渦糸格子を形成した場合を考える。前節と異なる点は、ベクトルポテンシャルを通じて一定磁場を導入し、かつ、周期境界条件を果たして解く点で、この他は前節の孤立した渦糸の場合と同じである。渦糸格子を考える場合に問題となるのは、単位格子をどう選ぶか? という点であるが、この格子の形状に層状構造の存在が大きく影響している。第 2 節で見たように、平行磁場では層状超伝導体の渦糸は超伝導層の層と層の間を通過するのがエネルギー的に得である [4]。そこで各渦糸の中心が層と層のちょうど中間に位置するという条件の下で渦糸格子ができるので、単位格子の層に垂直な方向の長さは、層状構造の周期のちょうど整数倍でなければならない。そうすると、磁場が変化し単位格子の大きさが変化する

場合、これら異なる周期の格子構造の間の一次転移が次々と起こることが期待される。この一次転移の存在は Bulaevskii と Clem によって提起されたものであるが [10]、一次転移の具体的な評価はまだなされていない。実験においては Oussena らが YBCO 単結晶において磁化のヒステリシス曲線の振動を観測しており、これが一連の一次転移の証拠であると主張している [11]。

この節の目的は、層状超伝導体に平行磁場をかけた場合の渦糸格子の平衡状態を数値的に求め、上述の一次転移についての具体的な評価を行なうことにある。また、磁化の磁場依存性についても計算する。平衡状態は Lawrence-Doniach 理論のフリーエネルギー汎関数を最小にするものとして得る。これらの計算は数値緩和法を用いることにより可能となった。物質パラメーターとしては YBCO に相当する値を選んで計算する。YBCO の場合、層間結合は非常に弱いというわけではないので、ペアポテンシャルの振幅は一定と仮定するわけにはいかず、振幅も空間的に変化しているとして扱う。温度が上がって層に垂直方向のコヒーレンス長が層間隔より長くなる時には 2 次元的なふるまいから 3 次元的なふるまいへのクロスオーバーが期待できるが、振幅の自由度を残して計算すれば、このクロスオーバーについての考察も可能となる。我々の計算ではこのコヒーレンス長の変化が渦糸格子の構造にどう影響するかを見るために、コヒーレンス長を何通りかに変えて計算する。ただし、渦糸格子についての以下の結果は渦糸格子の融解温度以下の温度で正しいのであまり大きなコヒーレンス長の場合は考えない。

3.2 数値緩和法による計算

層状超伝導体の Lawrence-Doniach 理論でのフリーエネルギーはベクトルポテンシャルの寄与も含めて

$$F = \frac{H_c^2}{4\pi} s \sum_j \int dx \left\{ \xi_{\parallel}^2 \left| \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{2\pi}{\phi_0} A_x \right) \psi_j(x) \right|^2 + (\gamma s)^{-2} |\psi_{j+1}(x) \exp(i\chi_{jj+1}) - \psi_j(x)|^2 - |\psi_j(x)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_j(x)|^4 \right\} + \int dx dy \frac{H^2}{8\pi}, \quad (3.1)$$

$$\chi_{jj+1} = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_{(j-1/2)s}^{(j+1/2)s} A_y dy = \frac{2\pi}{\phi_0} s A_y \quad (3.2)$$

となる。座標系と記号は第 2 節と同じであり、 H_c は熱力学的臨界磁場、 ϕ_0 は磁束量子、 (A_x, A_y) はベクトルポテンシャルである。今は典型的な第 2 種超伝導体を考えているので磁場 H は一定値と近似でき、ベクトルポテンシャルは Landau ゲージ $(A_x, A_y) = (-Hy, 0)$ を用いて考えることにする。

数値計算は単位格子一つ分の領域で行なう。渦糸格子の単位格子は図 3 のように長方形形状にとり、 y 方向の長さは $a_y = ns$ (n : 整数) と層間隔の整数倍にとる。 x 方向の長さは a_x とする。格子の基本ベクトルは $\mathbf{r}_1 = (a_x, 0), \mathbf{r}_2 = (\zeta a_x, a_y)$ で与えられる。層状超伝導体においては渦

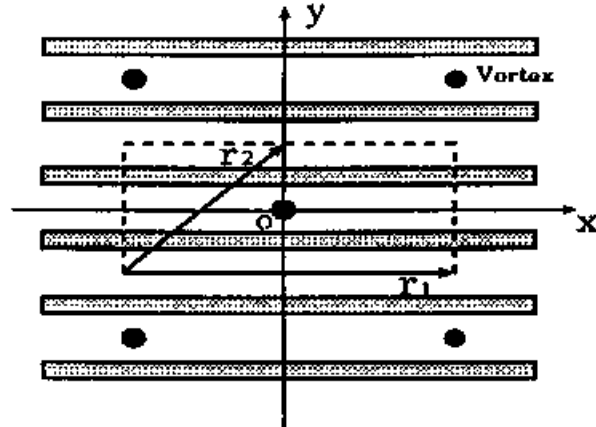


図 3: 2層周期 ($n = 2$) の場合の渦糸格子と 我々の用いる座標系。●の印は渦糸の中心を示している。この中心は超伝導層と超伝導層のちょうど中間に位置している。点線で囲まれた長方形が 我々の用いる単位格子で、 \mathbf{r}_1 と \mathbf{r}_2 が 基本ベクトルである。

糸の中心は 二等辺三角形の形状に配置されるので $\zeta = 1/2$ である。単位格子の大きさは 磁場の大きさにより

$$a_x a_y = \phi_0 / H \quad (3.3)$$

と決まる。我々の用いるゲージと格子の配置の場合、 $\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi_j(\mathbf{x})$ に対する磁場中での周期境界条件は次のようになる。

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r}) \exp \left[2\pi i n \left(\frac{x}{a_x} + \frac{\zeta}{2} n \right) - 2\pi i \left((m + n\zeta) \frac{y_0}{a_y} - n \frac{x_0}{a_x} \right) \right]. \quad (3.4)$$

ここで $\mathbf{r} = (x, y)$, $\mathbf{R} = m\mathbf{r}_1 + n\mathbf{r}_2$ (m, n : 整数) である。パラメーター (x_0, y_0) は 単位格子内での 渦糸の中心の位置に関するもので、ここでは 座標系の原点に その中心を置くために $(x_0, y_0) = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ と置く。

フリーエネルギー汎関数が最小となる状態は、前節と同様、緩和法で数値的に求められる。 F が十分に最小値 F_0 に収束するまで、各点での ペアポテンシャルの値についての緩和のステップ

$$\psi_j(x)^{(\text{new})} = \psi_j(x) - c \frac{\partial F}{\partial \psi_j^*(x)} \quad (c: \text{定数}) \quad (3.5)$$

を繰り返す。磁化 M は この F_0 を用いて

$$M = \frac{H}{4\pi} - \frac{\partial F_0}{\partial H} \quad (3.6)$$

から 求まる。

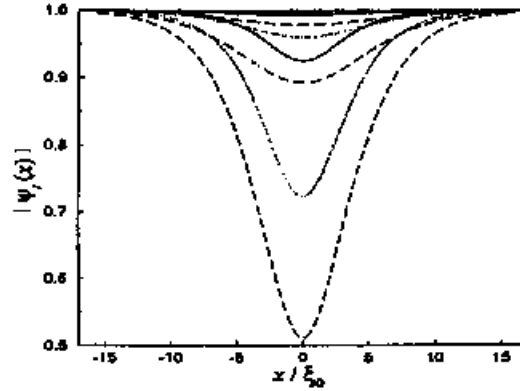


図 4: 6 層周期 ($n = 6$) の場合の 各層でのペアポテンシャルの振幅。コヒーレンス長については 3 つの場合; $\xi_{||}/\xi_0 = 1$ (実線), 2(点線), 3(鎖線) を示している。各場合において、一番下の線が渦糸の中心に最も近い層で、2 番目 (3 番目) に下の線が渦糸の中心から 2 番目 (3 番目) に近い層のものである。

3.3 ペアポテンシャルのようす

ここでの数値計算では、YBCO を想定して、物質パラメーターは $\gamma = 6.3$, $s = 11.6 \text{ \AA}$, 面内の BCS コヒーレンス長 $\xi_0 = 16 \text{ \AA}$ を用いる。これらの物質パラメーターの値は Oussena らが彼らの論文 [11] のなかで主張している値である。この節では彼らの実験と我々の計算の比較をするため、これらの数値を用いることにする。(これらの数値は第 2, 第 4 節で用いたものとは若干異なっているので注意して下さい。) 面内のコヒーレンス長としては 6 つの場合: $\xi_{||}/\xi_0 = 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5$ を考える。これは 温度が上がってコヒーレンス長が大きくなった時、渦糸格子の構造にどのような変化が出るかを見るためである。ただし、極端に長いコヒーレンス長の場合は T_c 近くの渦糸流体相に対応してしまうので、その場合は考えない。

まずは 単位格子の大きさを指定した場合の ペアポテンシャルの計算結果を示す。図 4 に示されているのは 6 層周期の場合 ($a_y = 6s$, $a_x = 6s \times 2\gamma/\sqrt{3}$) である。この a_x の値は 層構造がない均質な超伝導体における渦糸格子の場合の値を用いた。計算結果で注目すべきは、孤立渦糸の場合と同じく、渦糸の中心に最も近い層でも振幅 $|\psi_j(x)|$ の最小値は $|\psi_0|$ のオーダーのままである点である。 $\xi_{||} = \xi_0$ の場合、振幅の最小値は $0.92|\psi_0|$ までしか 下がらないで、振幅が変化している渦糸芯の領域はコヒーレンス長のオーダーより広がっていて ジョセフソン長 $\gamma s = 4.6\xi_0$ のオーダーになっている。 $\xi_{||}$ が増加すると、 $|\psi_j(x)|$ の最小値は減少し、渦糸芯の領域は広がっていった 隣の層へも広がっていく。これは 3 次元的な振舞いへのクロスオーバーである。

高磁場になって 渦糸どうしの間隔が ジョセフソン長より短くなった場合の渦糸構造もまた

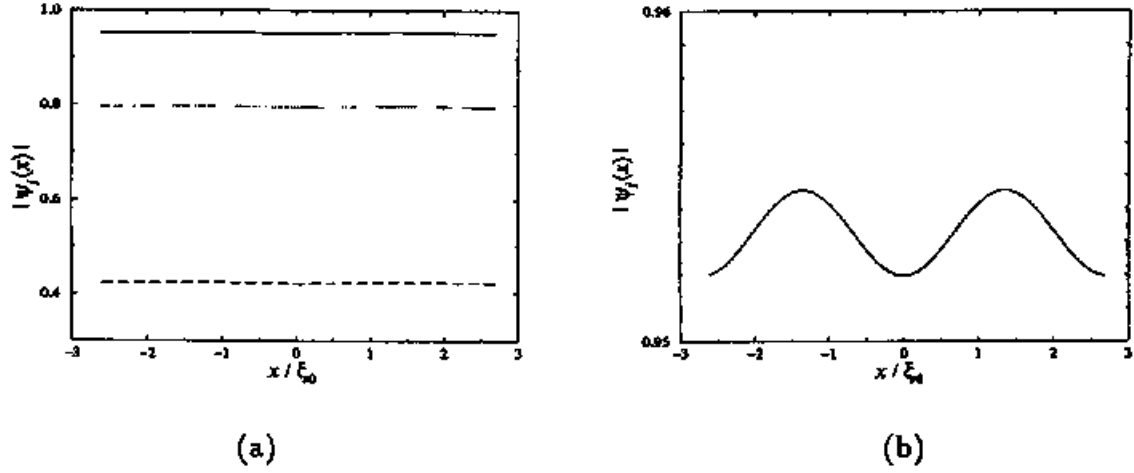


図 5: (a) 1 層周期 ($n = 1$) の場合の 各層でのペアポテンシャルの振幅。コヒーレンス長については 3 つの場合; $\xi_{||}/\xi_0 = 1$ (実線), 2(点線), 3(鎖線) を示している。(b) $\xi_{||}/\xi_0 = 1$ の場合の線を拡大したもの。

興味深い。その一例として、1 層周期の場合 ($a_y = s$, $a_x = s \times 2\gamma/\sqrt{3}$) の計算結果を図 5 に示す。2 層周期の場合もだいたい同様の構造である。これらの場合、ペアポテンシャルの振幅の大きさは拡大してみるとわずかに渦糸の中心に近いところで小さな値となるが、この程度であれば層のどの部分でも振幅はほぼ一定値であると見なして良いといえる。ただし、この一定値の値は磁場のため抑制されており、磁場のない時の値 1 より小さな値になっている。 $\xi_{||}$ が増加すると、振幅の大きさが減少していくが、層内の全領域で振幅がほぼ一定値であるといえる状態は保ったままである。

3.4 一次転移の評価 および 磁化の磁場依存性

次に、磁場が変化する時に起こる異なる周期の構造の間の一次転移について考察する。要は、与えられた磁場 H のときに何層周期の構造が平衡状態になっているかを調べれば良い。この問題に対するこれまでの唯一の予想は、層状構造がない均質な超伝導における渦糸格子の単位格子の形に近い形の格子構造が、層状超伝導体の渦糸格子でも実現していると考えられるものである [10]。非等方の London 理論や Ginzburg-Landau 理論では、均質な物質を仮定しているので層に垂直方向と水平方向の長さをそれぞれのコヒーレンス長でスケールし直した場合、渦糸格子は正三角形の形となる。そのため $a_y = ns$ のときには $a_x = ns \times 2\gamma/\sqrt{3}$ となる [12]。よって、式 (3.3) より、 n 層周期の渦糸格子が実現するのは $(H_0/H_n)^{1/2} = n$, $H_0 = \sqrt{3}\phi_0/2\gamma s^2$ で与えられる H_n の値に近い値の磁場においてであることが予想される。YBCO では H_0 は 210 T[テスラ] と評価される。この予想と我々の数値計算の結果を比較しやすくするため、以下、

表 1: 平衡状態において 周期 $n = 1, 2, 3, \dots, 9$ の 渦糸格子が実現する $(H_0/H)^{1/2}$ の値。 $\xi_{||}$ については 6 つの場合を計算した。

$\xi_{ }/\xi_0$	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5
$n=1$	~ 2.19	~ 2.17	~ 2.16	~ 2.17	~ 2.18	~ 2.22
2	2.19 \sim	2.17 \sim	2.16 \sim	2.17 \sim	2.18 \sim	2.22 \sim
3	3.94 \sim	3.92 \sim	3.89 \sim	none	none	none
4	3.99 \sim	3.95 \sim	3.90 \sim	3.86 \sim	3.83 \sim	3.82 \sim
5	4.89 \sim	4.86 \sim	4.81 \sim	4.77 \sim	4.73 \sim	4.71 \sim
6	5.83 \sim	5.80 \sim	5.76 \sim	5.73 \sim	5.69 \sim	5.67 \sim
7	6.79 \sim	6.77 \sim	6.73 \sim	6.70 \sim	6.67 \sim	6.65 \sim
8	7.76 \sim	7.74 \sim	7.71 \sim	7.68 \sim	7.66 \sim	7.64 \sim
9	8.73 \sim	8.72 \sim	8.70 \sim	8.67 \sim	8.64 \sim	8.62 \sim

磁場の依存性は $(H_0/H)^{1/2}$ の関数として考えることにする。この予想は、渦糸間の距離が十分長く 層状構造がそれほど渦糸構造には重要でないと考えられる時は 正しいと思われるが、渦糸間の距離が短くなった場合は 層状構造の寄与が重要になり、この予想から 外れる可能性が十分にある。この点を数値計算で検討するのが我々のねらいである。

磁場 H が変化するとき、 n 層周期の渦糸格子では a_y は ns に固定され、 a_x が式 (3.3) にしたがって変化する。磁場を変化させながら、渦糸格子の各周期の場合の構造とそのフリーエネルギーの値を計算する。平衡状態は それらの周期 $n = 1, 2, \dots$ の 構造の中で最小のフリーエネルギーの値を持つものである。その計算結果としては、表 1 に 平衡状態において周期 $n = 1, 2, 3, \dots, 9$ の 渦糸格子が実現する $(H_0/H)^{1/2}$ の値が示してある。これら異なる周期の構造の間の相転移は 一次転移である。 $\xi_{||} = \xi_0$ と $\xi_{||} = 3\xi_0$ の 場合については各周期の格子構造について 磁化の磁場依存性を 図 6 に示しておく。ここで 磁化は $H_c^2 \xi_{||}^2 / 4\pi\phi_0 (= \hbar^2 |\psi_0|^2 / 2m^* \phi_0 = \phi_0 / 32\pi^3 \lambda_{||}^2)$ を 1 とする単位で記しており、平衡状態に相当する部分の曲線を実線で示している。よって、 n の異なる実線の間のとびが 一次転移による 磁化のとびを表している。 $\xi_{||}$ が ξ_0 から $3\xi_0$ に増加するとき、磁化の絶対値は減少するが、平衡状態での磁化曲線の形は あまり変わらない。

最初に磁化曲線の全体としての形を考察する。非等方 London モデルによると $H_{c1} \ll H \ll H_{c2}$ では

$$M(H) = -c_1 \frac{\phi_0}{32\pi^2 \lambda_{||}^2 \gamma} \ln \left(c_2 \frac{\gamma s^2 H_0}{\xi_{||}^2 H} \right), \quad (3.7)$$

$c_1 = 1$, $c_2 = 0.0712$ となる [12, 13]。(図 6 の鎖線 A と C がこれを示している。) 我々の計算結果でも、磁化曲線の細かい構造を平均したものを考えると、平衡状態についての磁化曲線 (図 6 の実線) は 式 (3.7) でフィッティングできる。ただし、パラメーター c_1, c_2 は London モデルとは異なる値で $\xi_{||} = \xi_0$ の場合には $c_1 = 1.22$, $c_2 = 3.11$ [図 6(a) の鎖線 B], $\xi_{||} = 3\xi_0$ の場合には

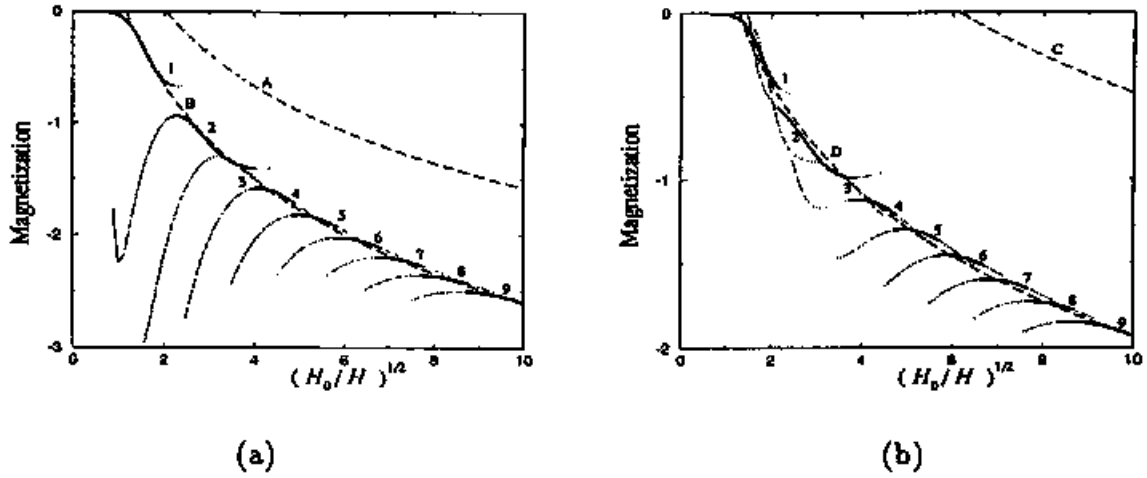


図 6: 周期 $n = 1, 2, \dots, 9$ の渦糸格子に対する磁化の磁場依存性。平衡状態に対応する曲線の部分は実線で表しており、磁化は $H_c^2 \xi_{||}^2 / 4\pi$ を 1 とする単位で記している。コヒーレンス長については 2 つの場合: $\xi_{||} = \xi_0$ (a) と $\xi_{||} = 3\xi_0$ (b) を計算した。鎖線 A, B, C, D は式 (3.7) によるフィッティング曲線で、フィッティングのパラメーターは以下の通り: A と C に対して $c_1 = 1$, $c_2 = 0.0712$ (非等方 London 理論), B に対して $c_1 = 1.22$, $c_2 = 3.11$, D に対して $c_1 = 0.942$, $c_2 = 23.4$ 。

$c_1 = 0.942$, $c_2 = 23.4$ [図 6(b) の鎖線 D] で最も良いフィッティングとなる。我々の計算では c_2 の値が大きくなっている。これは、層状超伝導体の場合は図 4 に示されるように渦糸のまわりでの超伝導でない電子の数が均質な超伝導の場合に比べ少なくなっており、London モデルでは半径 $\xi_{||}$ より中の渦糸芯の領域ではノーマル状態であるとして磁化を計算するが、今の場合は内部がノーマル状態であるとする実効的な渦糸芯の半径が $\xi_{||}$ よりももっと小さくなっているためと考えられる。式 (3.7) で言うと、 \ln 中の $\xi_{||}$ はもっと小さな値でなければならないが、フィッティングでは $\xi_{||}$ を使っているなのでそのはねかえりとして c_2 が大きくなっていると考えられるものである。

次に一次転移による磁化曲線の振動について考察する。 $(H_0/H)^{1/2} > 4$ の磁場領域に関しては、磁化は $(H_0/H)^{1/2}$ でプロットすると周期的な振舞いとなる。これは a_y/a_x の比が均質な理論での値 $\sqrt{3}/2\gamma$ にほぼ等しくて、 n 層周期の格子が H_n の近くの磁場で平衡状態として存在していることを反映している。 $\xi_{||}$ が増加すると、あまり大きな変化はないが、一次転移の起こる $(H_0/H)^{1/2}$ の値がわずかに減少し、それとともに転移での磁化のとびがわずかに増大している。

一方で、 $(H_0/H)^{1/2} < 4$ の高磁場領域になると、磁化はこの周期的なふるまいからずれてくる。 $n=1, 2$ の領域が $(H_0/H)^{1/2}$ のより大きな値のところまで存在し、そのため、 $n=3$ の領域がほとんどなくなっている。これは高磁場になって渦糸の間の距離がジョセフソン長のオー

ダー以下に短くなると層構造の存在が渦糸間の相互作用に影響を及ぼし、平衡状態の渦糸格子の a_y/a_x の比が $\sqrt{3}/2\gamma$ より小さくなって、層に平行な方向につぶれた形の単位格子が実現していることを示している。

平衡状態で1層周期の渦糸構造が実現しているような極めて高磁場領域においては、Bulaevskii と Clem が磁化の高磁場での漸近的な磁場依存性を、層間結合の弱い極限、つまり、ペアポテンシャルの振幅を一定と見なして良い場合について計算している [10]。そして、その結果、

$$M(H) = -c_3 \frac{\phi_0}{32\pi^5 \lambda_{\parallel}^2 \gamma} \left(\frac{H_0}{H} \right)^3, \quad (3.8)$$

$c_3 = 1$ となることを提起している。一方、我々の数値計算の結果もまた、 $(H_0/H)^{1/2} < 1$ の極めて高磁場においては式 (3.8) を満たしている。ただし、 c_3 の値は彼らの理論とは異なる値で、 $\xi_{\parallel} = \xi_0$ の場合は $c_3 = 1.90$ 、 $\xi_{\parallel} = 3\xi_0$ の場合は $c_3 = 0.336$ である。この不一致は我々の場合層間の結合が必ずしも弱い極限ではないことによると考えられる。

3.5 実験結果との比較

ここまで、層状超伝導体の平行磁場での渦糸格子について、Lawrence-Doniach 理論の枠組で平衡状態での渦糸格子の構造を数値的に求めた。また、磁化の磁場依存性を計算した。この磁化曲線は図6のようになったが、その曲線には異なる周期の格子構造の間の一次転移の結果として振動が見られた。これに対応した実験として、Oussena らが YBCO で測定した磁化曲線のデータを図7に示しておく [11]。磁場を a 軸にかけた場合 (a) と b 軸に書けた場合 (b) で、それぞれ、温度は、上から 30K, 40K, 50K, 60K と変えて測定したものである。振動を見やすくするため、生データから磁場の一次に比例したバックグラウンドを引いたデータで、かつ、縦軸に沿って曲線を平行移動したものを示している。横軸は $H^{-1/2}$ でプロットしており、鎖線の縦線の目盛は磁場が $(H_0/H)^{1/2} = n$ 、(左から $n = 1, 2, 3, \dots$) となる点を示している。(a) では横軸 0.276(0.552) の点で、(b) では横軸 0.26(0.52) の点で $n = 4$ ($n = 8$) となる点である。

彼らのデータはすべて、 $(H_0/H)^{1/2} > 4$ の磁場領域でなされており、 $(H_0/H)^{1/2}$ でプロットすると周期的な振舞いが見られる。我々の数値計算の結果もまた、 $(H_0/H)^{1/2} > 4$ においては、 $(H_0/H)^{1/2}$ でプロットすると周期的な振舞いが見られる。この周期的な振動をすること、および、その振動の周期の値は彼らの実験と我々の数値計算の結果でまさしく一致している。よって、この磁化曲線の振動は、異なる周期の格子構造の間の一次転移のよるものであると結論づけられる。ただし、詳細な点まで着目すると、両者の間に不一致も見られる。振動の一周期分の中の波形が一致していないし、また、実験データでは温度が上がると振動の振幅が大きくなるが、数値計算の結果では温度が変化してコヒーレンス長が変化したとしても、磁化曲線の形はあまり変化しない。これらの解明は今後の課題である。両者のうち、実験データの問題点

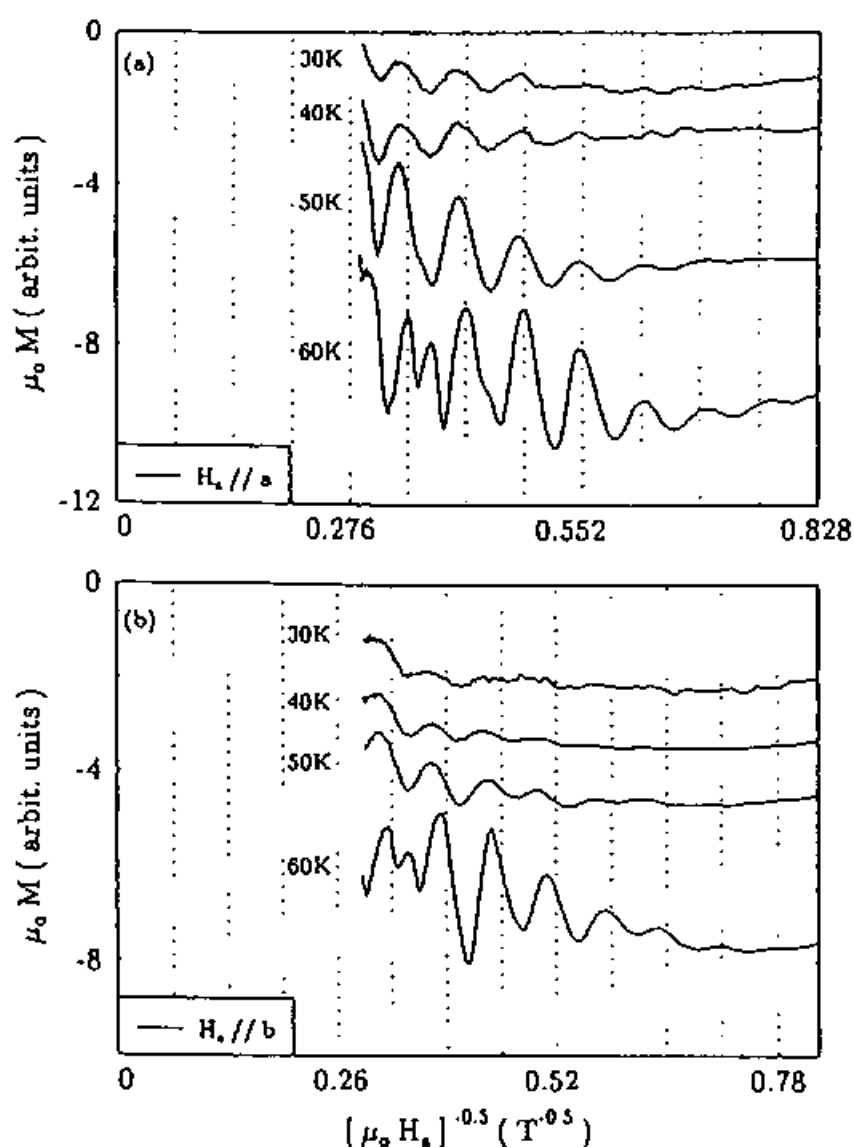


図 7: Oussena らによる YBCO での 磁化の磁場依存性の実験データ。磁場を a 軸にかけた場合 (a) と b 軸にかけた場合 (b) で、それぞれ、温度は、上から 30K, 40K, 50K, 60K の各場合。振動を見やすくするため、生データから磁場の一次に比例したバックグラウンドを引いたデータで、かつ、縦軸に沿って曲線を平行移動して示している。横軸は $H^{-1/2}$ でプロットしており、鎖線の縦線の目盛は磁場が $(H_0/H)^{1/2} = n$, (左から $n = 1, 2, 3, \dots$) となる点を示している。

は磁化曲線の精度である。実際、彼らは一次転移を主張しているのに彼らの実験データでは一次転移をはっきり示す磁化の とびの位置ははっきり見えない。よって、磁化の振動の波形の詳細までを議論できる程には実験データに精度がないのでは？と考えられる。今後、より精度の良い実験がなされ、振動の波形の詳細までを含めて、Oussena らの データの再現性のチェックがなされることを期待する。我々の数値計算の問題は、出発点に用いた Lawrence-Doniach 理論の妥当性である。Lawrence-Doniach 理論は、層内での超伝導を GL 方程式で扱っており、 H_{c2} から離れてくると、Lawrence-Doniach 理論では十分でないということが起きるかもしれない。現状では、Lawrence-Doniach 理論が層状超伝導体のモデルとして最も好ましいと考えられており、我々の数値緩和法を用いた研究により、この理論から実験と比較可能な形で磁化の振舞いが示されたところである。今後は精度のより良い実験がなされ、数値計算の結果との比較がなされることにより、Lawrence-Doniach 理論の 妥当性についての検討がされるべきである。

高磁場側の $(H_0/H)^{1/2} < 4$ では、我々の計算結果から $M(H)$ が $(H_0/H)^{1/2}$ でプロットした場合の周期的な振舞いからずれてくることが示唆された。これは層状構造の重要性を示す 貴重な手がかりの一つであり、実験での検証を 期待する。YBCO において これは $H > H_0/16=13.1$ T であるが、Oussena らは この磁場領域までは実験していない。この他にも、この点に注目した実験は まだされていない。この磁場領域は YBCO では やや高磁場すぎて実験が容易でないかもしれない。が、Tl 系や Bi 系などの酸化物高温超伝導体のように 異方性のより大きな物質においては、周期的な振舞いからずれると予想される磁場の値が小さくなるので、これらの物質では 容易に実験できると思われる。

4 孤立した渦糸のまわりでの 束縛された準粒子励起

4.1 はじめに

超伝導状態では電子は準粒子を形成しており、この準粒子の励起は 超伝導エネルギーギャップを持っている。第 2 種超伝導体の混合状態において 超伝導体中に磁場が侵入し渦糸を形成している場合、この渦糸のまわりの準粒子がどのようになっているかは Caroli, de Gennes, Matricon らによって初めて計算された [6]。彼らは孤立した渦糸の場合について Bogoliubov-de Gennes 方程式を解析的に解くことにより 準粒子のエネルギー固有値とそれに対応した波動関数を求めている。彼らによる結果の興味深い点は、渦糸のまわりには超伝導エネルギーギャップよりも小さな励起エネルギーを持つ束縛された準粒子励起が存在することを示した点である。最近、NbSe₂ において Hess らが 走査型トンネル顕微鏡 (STM) による渦糸芯のくっきりとした像を観測している [7]。これに続いて、Shore ら [14]、または、Gygi と Schluter [15] が Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値的に解くことにより、この渦糸芯の像は 渦糸のまわりに束縛された準粒

子の低エネルギーの励起によるものであることを示した。

さて、層状超伝導体の場合この準粒子励起がどのようなになるかが問題である。層に垂直な磁場の場合はこれまで考えてきたバルクの場合と同じ形の準粒子励起となることが示される。しかしながら、層に平行な磁場の場合、第2節で述べた通り、渦糸の中心が層と層の中間に位置することにより、ペアポテンシャルの振幅の最小値は磁場がない場合のエネルギーギャップと同じオーダーの値である。よって、準粒子励起はバルクの場合や層に垂直な磁場の場合とはまったく異なる状態であることが予想され、束縛状態の存在さえも自明ではない。本章の目的は、この平行磁場での準粒子励起のエネルギー固有値と波動関数を求め、平行磁場の場合でも束縛状態が存在することを示すことである。なお、層状超伝導体の電子系のモデルとしては電子間の引力は同一層内でのみはたらき、層間の相互作用は電子の層間とび移りを通してのみ与えられるというモデルを用いる。

この節では以下の順で議論を進めていく。まずは、バルクの場合についてレビューして、それが層状超伝導体で層に垂直な磁場の場合にどう修正されるかを説明する。これは平行磁場の場合の議論の前に渦糸のまわりでの準粒子励起を考える際のポイントを明らかにしておくのが目的である。次に、平行磁場の場合の最低エネルギーの準粒子励起を考える。平行磁場の場合については、層間結合の取り扱いが必要な分、扱う表式が複雑であるので解析的なアプローチは不可能である。そこで、数値緩和法により、最低エネルギーの励起状態を求めるという方法を用いる。そしてさらに上のエネルギー準位の励起状態を求めるわけであるが、平行磁場の場合はエネルギー準位を指定する量子数が存在しないので計算が簡単ではなくなる。そこで、シュミットの直交化法を用い、下のエネルギー準位の波動関数と直交するという条件をはたして Bogoliubov-de Gennes 方程式を解くことにより、より上のエネルギー固有値を持つ励起状態を求める。こうして下から10番目までの準位の準粒子励起状態を求め、その結果についての考察を行なう。

4.2 バルクの場合 および 層に垂直な磁場の場合

渦糸のまわりの準粒子励起を考える際のポイントを明らかにするため、まずは Caroli, de Gennes, Matricon らによるバルクの場合での議論をレビューする [6]。孤立した渦糸のまわりの準粒子励起を議論するためには、次の Bogoliubov-de Gennes 方程式を解けば良い。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2k_F}(-\nabla^2 - k_F^2) & \Delta \\ \Delta^* & -\frac{1}{2k_F}(-\nabla^2 - k_F^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

この式はエネルギーについては磁場がない時のエネルギーギャップ Δ_0 を1とし、長さについては $\xi_0 = v_F/\Delta_0$ (v_F はフェルミ速度) で定義されるコヒーレンス長を1として無次元化された形で書いている。また、 $\Delta = |\Delta(r)|e^{-i\theta}$ である。さて、動径方向 (r) と角度方向 (θ) および z 方向

を分離して考えるため、

$$\begin{aligned} u &= \exp(i(\mu - \frac{1}{2})\theta) \exp(ik_z z) \bar{u}(r), \\ v &= \exp(i(\mu + \frac{1}{2})\theta) \exp(ik_z z) \bar{v}(r) \end{aligned} \quad (4.2)$$

とおく。このうちの角度方向の変換については $\mp \frac{1}{2}\theta$ がペアポテンシャルを実数にするゲージ変換に相当しており、 $\mu\theta$ が波動関数 u, v の角度方向での振動モードである。渦糸のまわりを一周して戻ってきたら u, v のは元の値に一致しなければならないので $\mu \mp \frac{1}{2}$ は整数でなければならない。よって、 μ の値は半整数のみ ($\mu = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \dots$) をとる。なお、式(4.1)におけるベクトルポテンシャルの寄与は典型的な第二種超伝導体の孤立した渦糸を考える限りは無視できる。このことは次のような考察でわかる。式(4.1)におけるベクトルポテンシャルは $\frac{1}{i}\nabla \rightarrow \frac{1}{i}\nabla + \frac{\pi}{\phi_0}\mathbf{A}$ で導入され、渦糸の近くでは $A_\theta \sim Hr$ である。一方で、ペアポテンシャルの位相が渦糸のまわりで 2π まわっていることによる寄与は $(\frac{1}{i}\nabla e^{i\theta/2})_\theta = \frac{1}{2}(\frac{1}{i}\nabla\theta)_\theta \sim (2r)^{-1}$ である。渦糸のまわりの領域 ($r \sim \xi$) でこの両者を比べると

$$\frac{\frac{\pi}{\phi_0}A_\theta}{\frac{1}{2}(\frac{1}{i}\nabla\theta)_\theta} \sim \frac{2\pi}{\phi_0}Hr^2 \sim \frac{H}{H_{c2}} \ll 1 \quad (4.3)$$

となる。ここで $H_{c2} \sim \phi_0/\xi^2$ の関係、孤立した渦糸の状態は $H/H_{c2} \ll 1$ であることを用いた。よって、式(4.3)よりベクトルポテンシャルの寄与は無視して良いことがわかった。

式(4.2)を式(4.1)に代入すると、動径方向に関する \bar{u}, \bar{v} についての式が得られる。この式はスピノール表現

$$\hat{f}(r) = \begin{pmatrix} \bar{u}(r) \\ \bar{v}(r) \end{pmatrix}$$

を用いると

$$\frac{\sigma_x}{2k_F} \left\{ -\frac{d^2\hat{f}}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{d\hat{f}}{dr} + \left(\mu - \frac{\sigma_x}{2}\right)^2 \frac{\hat{f}}{r^2} - k_F^2 \hat{f} \sin^2 \alpha \right\} + \sigma_x |\Delta(r)| \hat{f} = \epsilon \hat{f} \quad (4.4)$$

と書ける。ここで σ_x, σ_z はパウリ行列であり、

$$\sin \alpha = \sqrt{1 - \frac{k_z^2}{k_F^2}} \quad (4.5)$$

である。ノーマル状態 ($\Delta=0$) での、式(4.4)の解は、Bessel 関数や Hankel 関数などの円柱関数であるが (円柱関数の詳細については付録 A.1 に記す)、これらはフェルミ準位での状態であり、波数 k_F^{-1} で はげしく振動している。超伝導で渦糸がある場合でも、この波数 k_F^{-1} での はげしい振動は存在しており、この振動の包絡線が渦糸構造を反映した形になっている。式(4.4)を解く方針としては、まず、 $k_F^{-1} \ll r_c \ll \xi_0 (=1)$ である半径 r_c を導入し、渦糸の中心部分と渦糸の外側部分に分けて式(4.4)の解を求める。そして、この両者の解が $r=r_c$ で連続につながるという条件をはたして解くことにより固有状態を求める。計算の詳細は付録 A.1 に譲るが、結果としては渦糸のまわりにはエネルギー固有値が

$$\epsilon = \mu \frac{\Delta_0^2}{E_F \sin \alpha} g(\alpha) \quad (\mu = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \dots) \quad (4.6)$$

の低エネルギー励起の束縛状態が存在することがわかる。ここで、 $g(\alpha)$ は 1 のオーダーの定数である。式 (4.6) からわかるように、半整数 μ がエネルギー準位を指定するパラメーターになっている。式 (4.2) を見てわかるように、この量子数 μ の状態は波動関数の渦糸のまわりでの巻き数が u は $\mu - \frac{1}{2}$ 回、 v は $\mu + \frac{1}{2}$ 回の状態である。励起エネルギーについては、 $\Delta_0^2/2E_F$ のギャップがあることが注目すべき結果である。 k_z (つまり α) を固定して見ると、式 (4.6) のように半整数 μ に対応した離散的なスペクトルに見えるが、実際にはあらゆる k_z の場合が存在するので全体としては $\epsilon > \Delta_0^2/2E_F$ については連続的なスペクトルが観測されるはずである。

次に層状超伝導体に垂直に磁場をかける場合を考える。この場合もベアポテンシャルの構造は z 方向 (磁場の方向を z 方向とする) に一様であり、渦糸の中心線に対して円筒対称であるので、式 (4.2) の分解が出来る。変更される点は式 (4.5) の $\sin \alpha$ が

$$\sin \alpha = \sqrt{1 - 2 \frac{E_J}{E_F} (1 - \cos k_z s)} \quad (|k_z| \leq \pi/s) \quad (4.7)$$

となる点のみである。層状超伝導体では $E_J \ll E_F$ であるので $\sin \alpha = 1$ として良い。よって、垂直な磁場の場合は、バルクの場合と全く同じ議論ができ、準粒子励起の固有状態の表式も式 (4.6) とまったく同じになる。ただし、バルクの場合と異なる点は α の値が $\sin \alpha = 1$ に限られることで、これにより、バルクの場合は $\epsilon > \Delta_0^2/2E_F$ で連続的なスペクトルだったものが、層状超伝導体で垂直磁場の場合は $\epsilon = \mu \Delta_0^2/2E_F$, ($\mu = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$) の離散的なスペクトルになることがわかる。

4.3 層に平行な磁場での 最低エネルギーの励起状態

バルクの場合や層状超伝導体でも層に垂直な磁場の場合に、うまく解が得られたのは次にあげる事実があったからである。

- 円筒対称な構造であるため 動径方向と角度方向の振舞いが完全に分離でき、 k_F の振動を動径方向の式に押し込めて考えることができたこと。
- 波動関数の位相の渦糸のまわりでの巻き数に関するパラメーター μ によってエネルギー準位が指定できること。

しかし、層状超伝導体で層に平行な磁場の場合にはこれらの事実は使えない。前者については、平行磁場の場合にはその形状から円筒対称性はなく、うまく変数分離する方法がない上に、層間結合をまともに考えなければならない。扱う式は一次元の式に帰着できず、解析的な取り扱い是不可能的である。後者については、平行磁場の場合には渦糸のまわりをまわる経路の途中に層間のジョセフソンの結合が入るため、波動関数の位相の巻き数がはっきり定義できなくなり、よって、巻き数によるエネルギー準位の指定ができない。平行磁場の場合はこのような困難をかかえているので、我々は次から述べるような数値的なアプローチを行っていく。

第2節と同様の座標系を用い、層状超伝導体で層に平行に磁場をかけた場合の Bogoliubov-de Gennes 方程式を考える。固有エネルギー ϵ の準粒子励起状態をスピノールの波動関数

$$\hat{f}(x, j, z) = \begin{pmatrix} u_\epsilon(x, j, z) \\ v_\epsilon(x, j, z) \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

で記述することになると、電子の層間とび移りは、Bogoliubov-de Gennes 方程式において

$$-E_J \left(\hat{f}(x, j+1, z) + \hat{f}(x, j-1, z) - 2\hat{f}(x, j, z) \right) \quad (4.9)$$

の形の層間結合の項として与えられる。この式での層間結合の係数 E_J は、GL 方程式 (2.1) での層間結合の係数 $\bar{E}_J = \hbar^2/2m_{||}\gamma^2 s^2$ と関係づけられ、 $E_J/T_c \ll 1$ (T_c は転移温度) の場合には $\bar{E}_J = E_J^2/E_F$ ($E_F = \hbar^2 k_F^2/2m_{||}$ はフェルミエネルギー) の関係がある [3]。この関係式を用いると Bogoliubov-de Gennes 方程式は無次元化された形で次のようになる。

$$\hat{H}|f\rangle = \epsilon|f\rangle, \quad \hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{T} & \Delta(x, j) \\ \Delta^*(x, j) & -\hat{T} \end{pmatrix}, \quad |f\rangle \equiv \hat{f}(x, j, z),$$

$$\begin{aligned} \hat{T}|f\rangle &= \frac{1}{2k_F} \left(-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dz^2} - k_F^2 \right) \hat{f}(x, j, z) \\ &\quad - \frac{1}{2\gamma s} \left(\hat{f}(x, j+1, z) + \hat{f}(x, j-1, z) - 2\hat{f}(x, j, z) \right). \end{aligned} \quad (4.10)$$

ここでもエネルギーについては Δ_0 (磁場のない時のエネルギーギャップ) を 1, 長さについてはコヒーレンス長 ξ_0 を 1 とする単位系を用いた。ペアポテンシャル Δ は第2節で計算した結果の値を用いる。ここでは層状超伝導体を対象としているので $\xi_{\perp} < s$ (ξ_{\perp} は層に垂直方向のコヒーレンス長)、つまり、 $\gamma s > 1$ の場合を考えるが、 $\bar{E}_J = E_J^2/E_F$ の関係式のかわりに $\bar{E}_J = E_J$ を用いれば式 (4.10) は $\xi_{\perp} \gg s$ の場合についても適用できる。この場合はバルクの場合の励起状態についての結果が得られる。

式 (4.10) の \hat{f} と Δ の位相を適当に選べば、 $x=0$ において u は純虚数、 v は実数となるようにできる。この場合、波動関数は

$$\hat{f}(x, j, z) = -\sigma_z \hat{f}^*(-x, j, -z) = \hat{f}^*(x, -j+1, -z) \quad (4.11)$$

という対称性を持っている。ここで σ_z はパウリ行列である。

波動関数の波数 $k_F (\gg 1)$ の速い振動をくり出すため、 \hat{f} を次のように置く。

$$\hat{f}(x, j, z) = \left(\hat{f}_1(x, j) \exp(ix\sqrt{k_F^2 - k_z^2}) + \hat{f}_2(x, j) \exp(-ix\sqrt{k_F^2 - k_z^2}) \right) \exp(ik_z z). \quad (4.12)$$

ここで

$$\hat{f}_n(x, j) = \begin{pmatrix} u_{\epsilon, n}(x, j) \\ v_{\epsilon, n}(x, j) \end{pmatrix} \quad (n=1, 2) \quad (4.13)$$

は、ゆっくりと変化する関数である。式(4.12)を式(4.10)に代入し、準古典近似で $1/k_F$ のオーダーの項を無視すると、 $\hat{f}_1(x, j)$ についての次のような式が得られる。

$$\begin{aligned}\hat{H}_1|f_1\rangle &= \epsilon|f_1\rangle, \quad \hat{H}_1 = \begin{pmatrix} \hat{T}_1 & \Delta(x, j) \\ \Delta^*(x, j) & -\hat{T}_1 \end{pmatrix}, \quad |f_1\rangle = \hat{f}_1(x, j), \\ \hat{T}_1|f_1\rangle &= -i\sqrt{1 - (k_x/k_F)^2} \partial_x \hat{f}_1(x, j) \\ &\quad - \frac{1}{2\gamma_s} (\hat{f}_1(x, j+1) + \hat{f}_1(x, j-1) - 2\hat{f}_1(x, j)).\end{aligned}\quad (4.14)$$

以下、 $k_x = 0$ の場合の準粒子励起についての数値計算を行なうが $k_x \neq 0$ の場合も同様の計算ができる。準粒子励起の計算には数値緩和法を用いる。ただし、式(4.14)では \hat{H}_1 は正の定符合作用素ではなく ϵ と $-\epsilon$ の両方が同時に固有値となっている。そこで、数値緩和法を用いる場合にはまず、 $\epsilon^2 = \langle f_1 | \hat{H}_1^2 | f_1 \rangle / \langle f_1 | f_1 \rangle$ を最小にするように $|f_1\rangle$ を変化させていく [16]。そのためには各点での $\hat{f}_1(x, j)$ について、緩和のステップ

$$|f_1\rangle^{(\text{new})} = |f_1\rangle - c \frac{\partial \epsilon^2}{\partial \langle f_1 |}, \quad \frac{\partial \epsilon^2}{\partial \langle f_1 |} = \frac{\hat{H}_1^2 | f_1 \rangle - \epsilon^2 | f_1 \rangle}{\langle f_1 | f_1 \rangle} \quad (c: \text{定数}) \quad (4.15)$$

を収束するまで繰り返す。境界条件としては渦糸の中心から 11 層目 ($j = 11, -10$) の層で $\hat{f} = 0$ とし、層内については $x = \pm 40$ のところで自由境界条件を用いた。最終的には各点での $\hat{f}_1(x, j)$ について $|\langle \hat{H}_1^2 | f_1 \rangle|_l / \epsilon^2 |f_1\rangle|_l - 1| < 10^{-6}$ ($l = 1, 2$: スピノール表現での第 l 番目の成分) の条件が満たされるところまで達せられた。そして、最後に

$$(|f_1\rangle + \hat{H}_1|f_1\rangle)/\epsilon/2 \rightarrow |f_1\rangle \quad (4.16)$$

の変換により、固有値が ϵ と $-\epsilon$ の固有状態の重ね合わせの状態から、正の固有値の ϵ の固有状態を抜き出す。この結果得られる $|f_1\rangle$ は $|\langle \hat{H}_1 | f_1 \rangle|_l / \epsilon |f_1\rangle|_l - 1| < 10^{-6}$ の条件を満たすことが確かめられた。 $\hat{f}_2(x, j)$ については、式(4.11)と式(4.12)から得られる関係式

$$\hat{f}_2(x, j) = \hat{f}_1^*(x, -j+1) \quad (4.17)$$

から求められる。

この計算方法で $\gamma_s = 2.5$ の場合を計算した。こうして得られた最低エネルギーの準粒子励起 (第 1 準位) の固有状態の波動関数を図 8 に示す。 $j = 1, 2, \dots, 10$ の各層での u_1, u_2, v_1, v_2 の値を表しているが、この第 1 準位の状態は、渦糸の中心に最も近い層 ($j = 1$) にほぼ、局在した状態であるといえる。そして、その固有関数の広がりにはペアポテンシャルの振幅が減少している領域、つまり、ジョセフソン長のオーダーの広がりとはほぼ同じである。 x について $\text{Re}u_1, \text{Re}u_2, \text{Im}v_1, \text{Im}v_2$ は奇関数で $\text{Im}u_1, \text{Im}u_2, \text{Re}v_1, \text{Re}v_2$ は偶関数であるが、これは式(4.11)の対称性を反映した事実である。この渦糸のまわりに局在した第 1 準位の固有エネルギーは

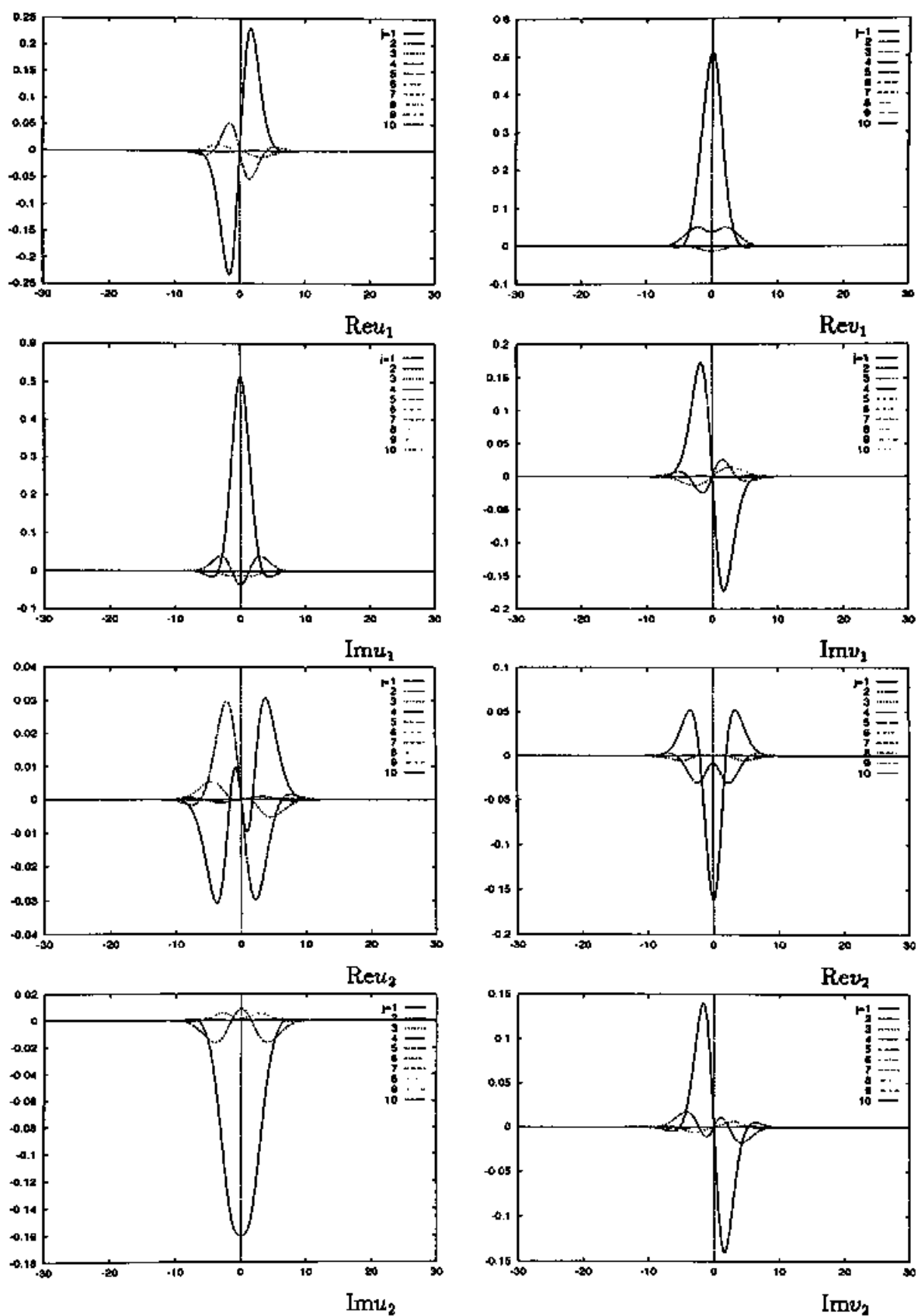


図 8: 各層 ($j = 1, 2, \dots, 10$) での最低エネルギーの励起 (第 1 準位) の固有状態。横軸は x 。

0.63 である。この値は 1 より小さいから、この最低エネルギーの励起状態は束縛状態であると言える。また、この最低エネルギーの励起状態の固有エネルギー ϵ がペアポテンシャルの振幅の最小値 0.75 より小さいことも注目に値する。これは渦糸のまわりを流れる電流の存在によって固有エネルギー ϵ が押し下げられているためと思われる。このことを確かめるため、 $\Delta(x, j)$ を実数のペアポテンシャル $|\Delta(x, j)|$ で置き換えた場合についても計算してみると、この場合の固有エネルギー ϵ は 0.87 となり、期待通り、ペアポテンシャルの振幅の最小値 0.75 より大きな値であった。

このようにして数値緩和法を用いることにより、層に平行に磁場をかけた場合について Bogoliubov-de Gennes 方程式から最低エネルギーの励起状態を求めることができた。この最低エネルギーの励起状態は固有エネルギーが Δ_0 より小さく束縛状態であるが、それでも固有エネルギーの値はペアポテンシャルの振幅の最低値よりやや小さいだけの値であり、依然として Δ_0 の大きさのオーダーであることがわかった。バルクの場合や層に垂直な磁場の場合には最低のエネルギー固有値は $\Delta_0^2/2E_F$ と低エネルギーであった。このような層に垂直な磁場の場合の $\Delta_0^2/2E_F$ の低エネルギーのギャップと層に垂直な場合の Δ_0 のオーダーの大きなエネルギーギャップは対照的であり、両者の閾値の違いは STM の実験などで観測されることが期待される。

4.4 層に平行な磁場での さらに上のエネルギー準位の励起状態

さらに上のエネルギー準位の励起状態を求めることを考える。前にも述べたように、バルクや層に垂直な場合には波動関数の位相の渦糸のまわりでの巻き数に関するパラメーター μ が各エネルギー準位を指定する量子数となっているので、 μ の値を変えて計算していけばすべてのエネルギー準位の状態が計算できる。しかしながら、層に平行な磁場の場合には、渦糸のまわりをまわる経路の途中に層間のジョセフソンの結合が入るため、この巻き数がはっきりしなくなる。そのため、エネルギー準位を指定する量子数が存在しない。そのため、各エネルギー準位の準粒子励起状態を計算するためには数値緩和法を用いて下の準位のものから順に求めていき、それらの下の準位すべての波動関数と直交するという条件のもとで数値緩和法によりもう一つ上の準位の状態を求めるという手法を用いる。この手法では計算機の容量の制限によりあまり多くの準位についての計算は無理であり、よってすべての準位の波動関数の情報が必要なセルフコンシステントな計算はできない状況にある。我々は下から 10 番目の準位までの励起状態についての計算を行なった。

実際の計算は、すでに求めた ϵ^2 の小さな状態 (ϵ の状態と $-\epsilon$ の状態) と直交するという条件のもとで ϵ^2 を最小にする状態を数値緩和法で求める。この計算では直交性を考えないといけな波動関数はひとつの ϵ^2 の値に対して非物理的なもの 2 つを含めて全部で 4 つある。一つ目は固有値 ϵ の状態であり、一つ前までの準位については式 (4.14), (4.15) による計算で求まっている。

これを

$$|f_1^{(\epsilon)}\rangle = \begin{pmatrix} u_{\epsilon,1}(x, j) \\ v_{\epsilon,1}(x, j) \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

とする。二つ目は固有値 $-\epsilon$ の状態を $|f_1^{(-\epsilon)}\rangle$ と表す。Bogoliubov-de Gennes 方程式の性質より

$$u \rightarrow -v^*, \quad v \rightarrow u^* \quad (4.19)$$

の変換が $\epsilon \rightarrow -\epsilon$ の変換に対応している。よって、この変換により固有値 ϵ の状態から固有値 $-\epsilon$ の状態が得られる。この変換 および 式(4.12)と(4.17)を用いると、式(4.18)の $u_{\epsilon,1}(x, j), v_{\epsilon,1}(x, j)$ を使って

$$|f_1^{(-\epsilon)}\rangle = \begin{pmatrix} -v_{\epsilon,1}(x, -j+1) \\ u_{\epsilon,1}(x, -j+1) \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

と書ける。これら二つの状態以外にも、 x 方向を離散化したために起こる状態が存在する。離散化した x 座標のラベルを i_x とすると、 i_x が一つ変わることにより波動関数の符号が正負正負...と変わる状態がそれであり、こんな状態は非物理的であるが、数値計算の上では存在するので考慮に入れなければならない。これらの非物理的な状態が $|f_1^{(\epsilon)}\rangle, |f_1^{(-\epsilon)}\rangle$ と縮退しているのは次のようにすればわかる。 $|f_1\rangle \rightarrow (-1)^{i_x}|f_1\rangle$ という変換を考えると式(4.14)において x 微分の項は差分に直して考えた場合、

$$-i\partial_x u_1 = -\frac{i}{2d}(u_1(i_x+1) - u_1(i_x-1)) \rightarrow i\partial_x u_1 \quad (4.21)$$

となるが、これは \hat{f}_2 の式に相当する。そこで、さらに、 $y \rightarrow -y$ とし複素共役をとると \hat{f}_1 の式に相当する形、つまり、式(4.14)の形になる。よって、固有値 ϵ の(非物理的な)固有状態として

$$|z_1^{(\epsilon)}\rangle = \begin{pmatrix} (-1)^{i_x} u_{\epsilon,1}^*(x, -j+1) \\ (-1)^{i_x} v_{\epsilon,1}^*(x, -j+1) \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

固有値 $-\epsilon$ の(非物理的な)固有状態として

$$|z_1^{(-\epsilon)}\rangle = \begin{pmatrix} -(-1)^{i_x} v_{\epsilon,1}^*(x, j) \\ (-1)^{i_x} u_{\epsilon,1}^*(x, j) \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

が得られる。

これらの状態と直交するという条件を果たす時には、シュミットの直交化法を用いる。それまでに求めた各エネルギー準位 $\pm\epsilon'$ の状態と直交する状態は

$$|\bar{f}_1\rangle = \left(1 - \sum_{n,\epsilon'} |g_1^{(n,\epsilon')}\rangle \langle g_1^{(n,\epsilon')}|\right) |f_1\rangle, \quad (4.24)$$

で与えられる。ここで $|f_1\rangle$ は任意の関数で、 $|g_1^{(n,\epsilon')}\rangle$ ($n=1\sim 4$)は $|f_1^{(\epsilon')}\rangle, |f_1^{(-\epsilon')}\rangle, |z_1^{(\epsilon')}\rangle, |z_1^{(-\epsilon')}\rangle$ から作られる4つの正規直交関数である。式(4.24)の形を持つ状態の中で $\langle \bar{f}_1 | H_1^2 | \bar{f}_1 \rangle / \langle \bar{f}_1 | \bar{f}_1 \rangle$ を最小にする状態を考えると、これに対応する緩和のステップは

$$|\bar{f}_1\rangle^{(\text{new})} = |\bar{f}_1\rangle + |\delta \bar{f}_1\rangle, \quad (4.25)$$

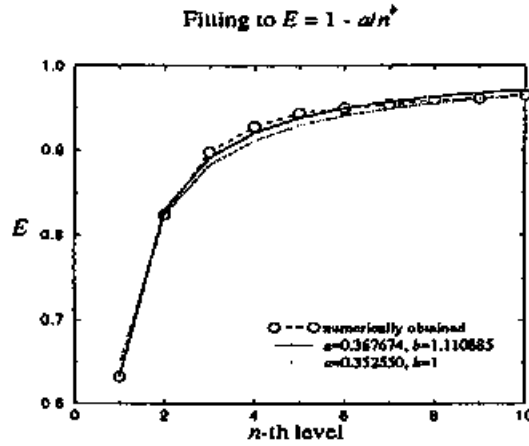


図 9: 第 n 準位でのエネルギー固有値 ϵ_n 。○印が数値計算で得られた値。(鎖線は見やすくするための線。) 点線と実線は式 (4.27) によるフィティングの線である。

$$|\delta \bar{f}_1\rangle = -c \left(1 - \sum_{n, \epsilon'} |g_1^{(n, \epsilon')}\rangle \langle g_1^{(n, \epsilon')}| \right) \frac{H_1^2 |\bar{f}_1\rangle - \epsilon^2 |\bar{f}_1\rangle}{\langle \bar{f}_1 | \bar{f}_1 \rangle} \quad (c: \text{定数}) \quad (4.26)$$

である。こうして求めた ϵ^2 について最低の状態は $\pm\epsilon$ の状態の重ね合わせになっているので、最後に 式 (4.16) の変換により正の固有値 ϵ についての固有状態を求める。

こうして、下から 10 番目までの励起状態を求めた。その エネルギー固有値は 以下の通りである。

第 1 準位	$\epsilon=0.6324$
第 2 準位	$\epsilon=0.8238$
第 3 準位	$\epsilon=0.8985$
第 4 準位	$\epsilon=0.9280$
第 5 準位	$\epsilon=0.9441$
第 6 準位	$\epsilon=0.9502$
第 7 準位	$\epsilon=0.9548$
第 8 準位	$\epsilon=0.9592$
第 9 準位	$\epsilon=0.9613$
第 10 準位	$\epsilon=0.9648$

これをグラフにしたものが図 9 である。この準位の番号 n とエネルギー固有値 ϵ の関係を

$$\epsilon = 1 - \frac{a}{n^b} \quad (4.27)$$

でフィティングしてみると、 $b=1$ に固定した場合は $a=0.353$ となり (図 9 中の点線)、 b もフィティングのパラメーターとした場合は $a=0.368, b=1.11$ となる (図 9 中の実線)。だいたいの傾向として、式 (4.27) が良いと言える。よって、エネルギー固有値が 1 より小さい 束縛状態は 層に平行な磁場の場合にも 無限個存在することが予想される。

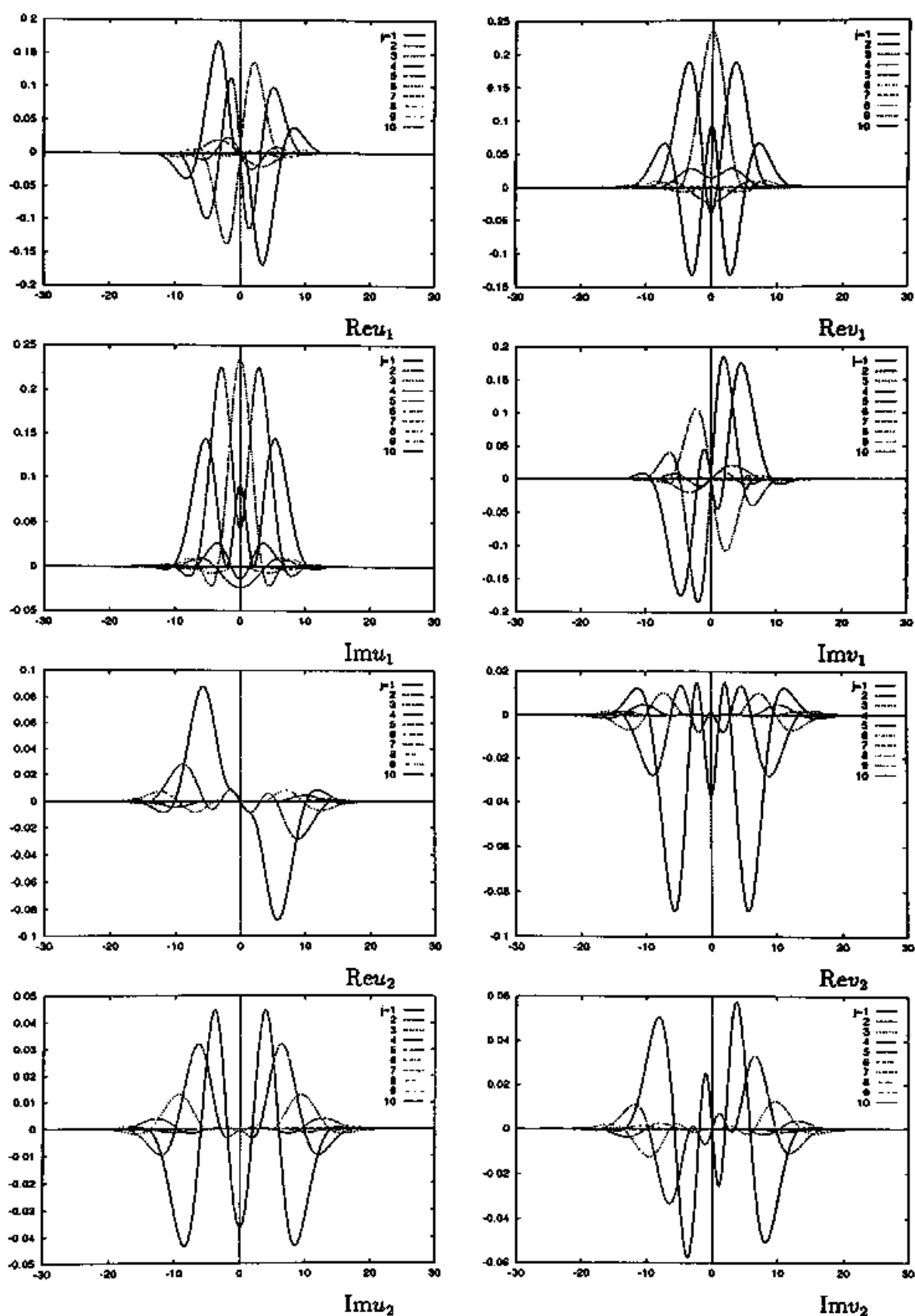


図 10: 各層 ($j = 1, 2, \dots, 10$) での 第3準位の固有状態。横軸は x 。

波動関数の広がり のようすについては その一例として 第3準位の場合を図10に示す。この状態は、渦糸の中心に最も近い層から3番目の層までにわたり広がって分布していることがわかる。次に、準位が上がるにつれ波動関数の広がりがどのように変わるかを見るため、各準位の準粒子励起状態の波動関数の振幅の2乗と、各準位の固有状態の波動関数からの層間ジョセフソン電流、ペアポテンシャルへの寄与を調べる。

固有エネルギー ϵ , スピン $\alpha(=\uparrow, \downarrow)$ の固有状態の生成(消滅)演算子 $\gamma_{\epsilon, \alpha}^\dagger$ ($\gamma_{\epsilon, \alpha}$)を用いると、固有エネルギー ϵ の状態の波動関数は各スピンに対して

$$\begin{aligned}\psi_{\epsilon, \uparrow}(\mathbf{r}) &= u_{\epsilon}(\mathbf{r})\gamma_{\epsilon, \uparrow} - v_{\epsilon}^*(\mathbf{r})\gamma_{\epsilon, \downarrow}^\dagger, \\ \psi_{\epsilon, \downarrow}(\mathbf{r}) &= u_{\epsilon}(\mathbf{r})\gamma_{\epsilon, \downarrow} + v_{\epsilon}^*(\mathbf{r})\gamma_{\epsilon, \uparrow}^\dagger\end{aligned}\quad (4.28)$$

と書ける。また、固有エネルギー ϵ の励起が存在する状態は $|\epsilon\rangle = \gamma_{\epsilon, \uparrow}^\dagger|0\rangle$ と書ける。これらを用いると、励起エネルギー ϵ の状態の波動関数の振幅の2乗は

$$|\psi_{\epsilon}(\mathbf{r})|^2 \equiv \langle \epsilon | \sum_{\alpha=\uparrow, \downarrow} |\psi_{\epsilon, \alpha}(\mathbf{r})|^2 | \epsilon \rangle = |u_{\epsilon}(\mathbf{r})|^2 + |v_{\epsilon}(\mathbf{r})|^2 \quad (4.29)$$

となり、また、固有エネルギー ϵ の準粒子状態が運ぶ層間 Josephson 電流密度は

$$\begin{aligned}J^{(j-1 \rightarrow j)}(x, z) &= \langle \epsilon | \left(-\frac{eE_J}{\hbar i} \right) \left\{ \psi(x, j-1, z)^* \psi(x, j, z) - \psi(x, j-1, z) \psi(x, j, z)^* \right\} | \epsilon \rangle \\ &= -\frac{ev_F}{2i\gamma_s} \left(u^*(x, j-1, z)u(x, j, z) - u(x, j-1, z)u^*(x, j, z) \right. \\ &\quad \left. - v^*(x, j-1, z)v(x, j, z) + v(x, j-1, z)v^*(x, j, z) \right) \quad (4.30)\end{aligned}$$

となる。準粒子状態とペアポテンシャルの間にはセルフコンシステントの関係式があるが、この式は

$$\Delta(\mathbf{r}) = |g| \sum_{\epsilon < 0} \langle \epsilon | \psi_{\epsilon, \downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\epsilon, \uparrow}(\mathbf{r}) | \epsilon \rangle = |g| \sum_{\epsilon < 0} u_{\epsilon}(\mathbf{r}) v_{\epsilon}^*(\mathbf{r}) \quad (4.31)$$

となる。よって、固有エネルギー ϵ の状態からのペアポテンシャルへの寄与として、 $u_{\epsilon}(\mathbf{r})v_{\epsilon}^*(\mathbf{r})$ を考えることにする。

基底状態 $|0\rangle$ では $\epsilon(>0)$ の状態は空で、 $-\epsilon(<0)$ の状態はすべて詰まっている。そこで、 ϵ の状態と $-\epsilon$ の状態の関係を考える。波動関数 u, v に対しては式(4.19)の変換を行なうと ϵ の状態から $-\epsilon$ の状態が得られる。この変換を式(4.29)-(4.31)に適用すると、 $\epsilon \rightarrow -\epsilon$ の変換に対して、 $|\psi_{\epsilon}(\mathbf{r})|^2, J^{(j-1 \rightarrow j)}(x, z)$ は不変で、 uv^* は $u_{\epsilon}(\mathbf{r})v_{\epsilon}^*(\mathbf{r}) \rightarrow -u_{\epsilon}(\mathbf{r})v_{\epsilon}^*(\mathbf{r})$ と変換される。

各準位の波動関数からの $|\psi_{\epsilon}(\mathbf{r})|^2, J^{(j-1 \rightarrow j)}(x, z), u_{\epsilon}(\mathbf{r})v_{\epsilon}^*(\mathbf{r})$ への寄与については、式(4.12)を用いると、それぞれ、波数 $2k_F(\gg 1)$ の速く変化する項と ゆっくり変化する項に分けられる。速く変化する項は無視することにと

$$|\psi_{\epsilon}(\mathbf{r})|^2 = |u_{\epsilon, 1}(\mathbf{r})|^2 + |u_{\epsilon, 2}(\mathbf{r})|^2 + |v_{\epsilon, 1}(\mathbf{r})|^2 + |v_{\epsilon, 2}(\mathbf{r})|^2, \quad (4.32)$$

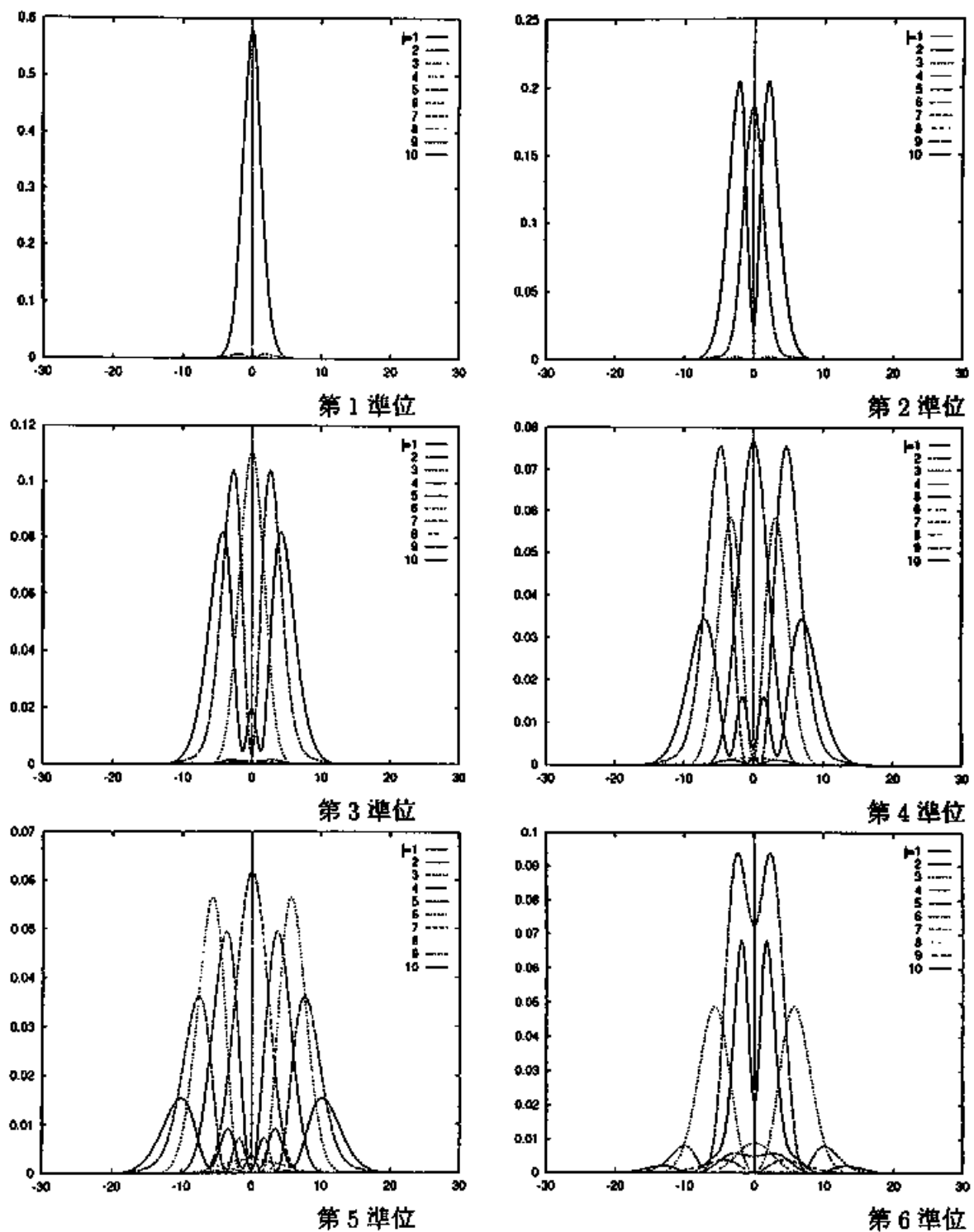


図 11: 第1準位から第6準位までの各エネルギー準位での波動関数の振幅の2乗: 各層 ($j = 1, 2, \dots, 10$) での $|\psi_e(r)|^2$ 。横軸は x 。

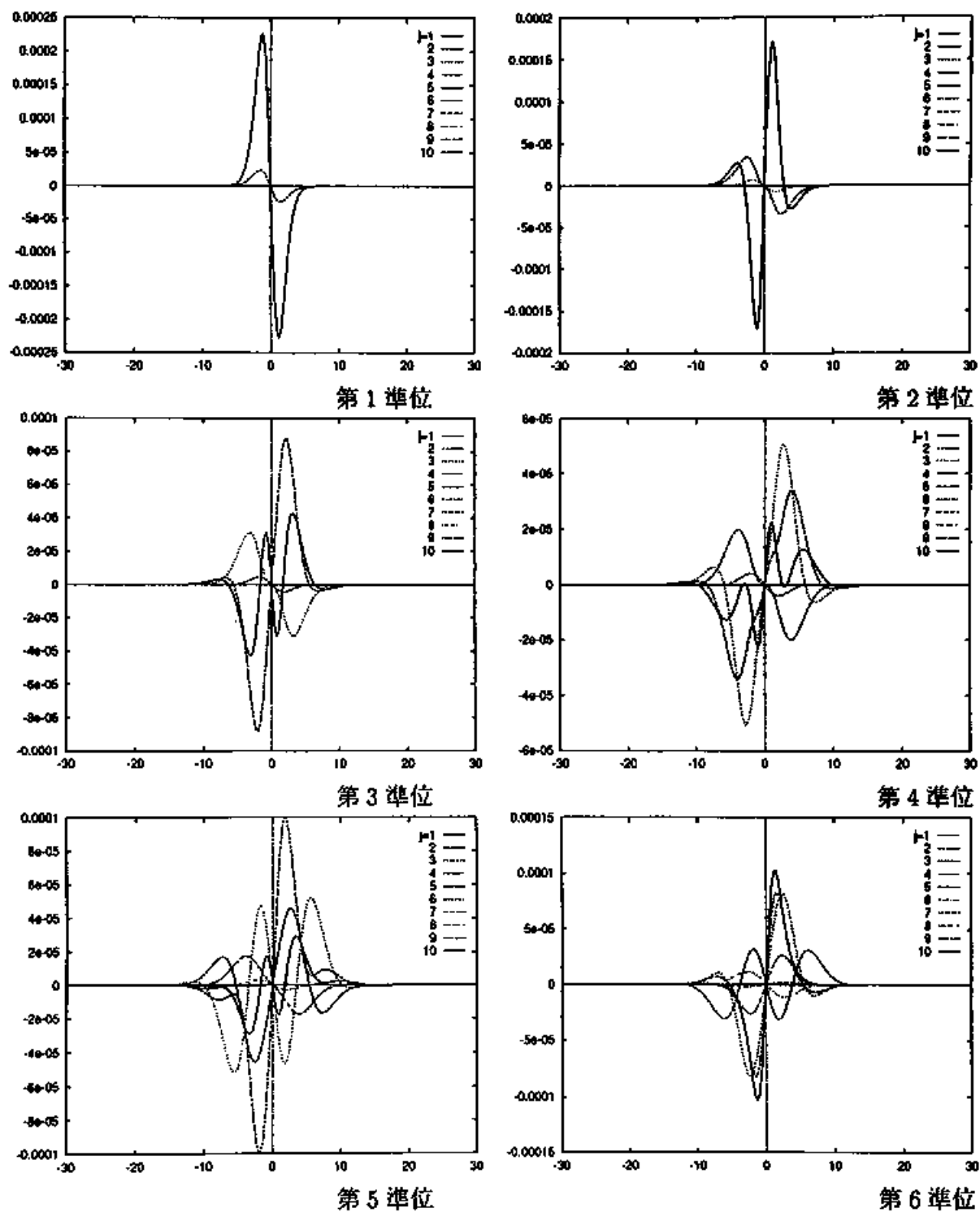


図 12: 第 1 準位から第 6 準位までの各エネルギー準位の波動関数からの層間ジョセフソン電流への寄与: 各層 ($j = 1, 2, \dots, 10$) での $J^{(j-1 \rightarrow j)}(x, z) / (-ev_F / 2\gamma s)$ 。横軸は x 。

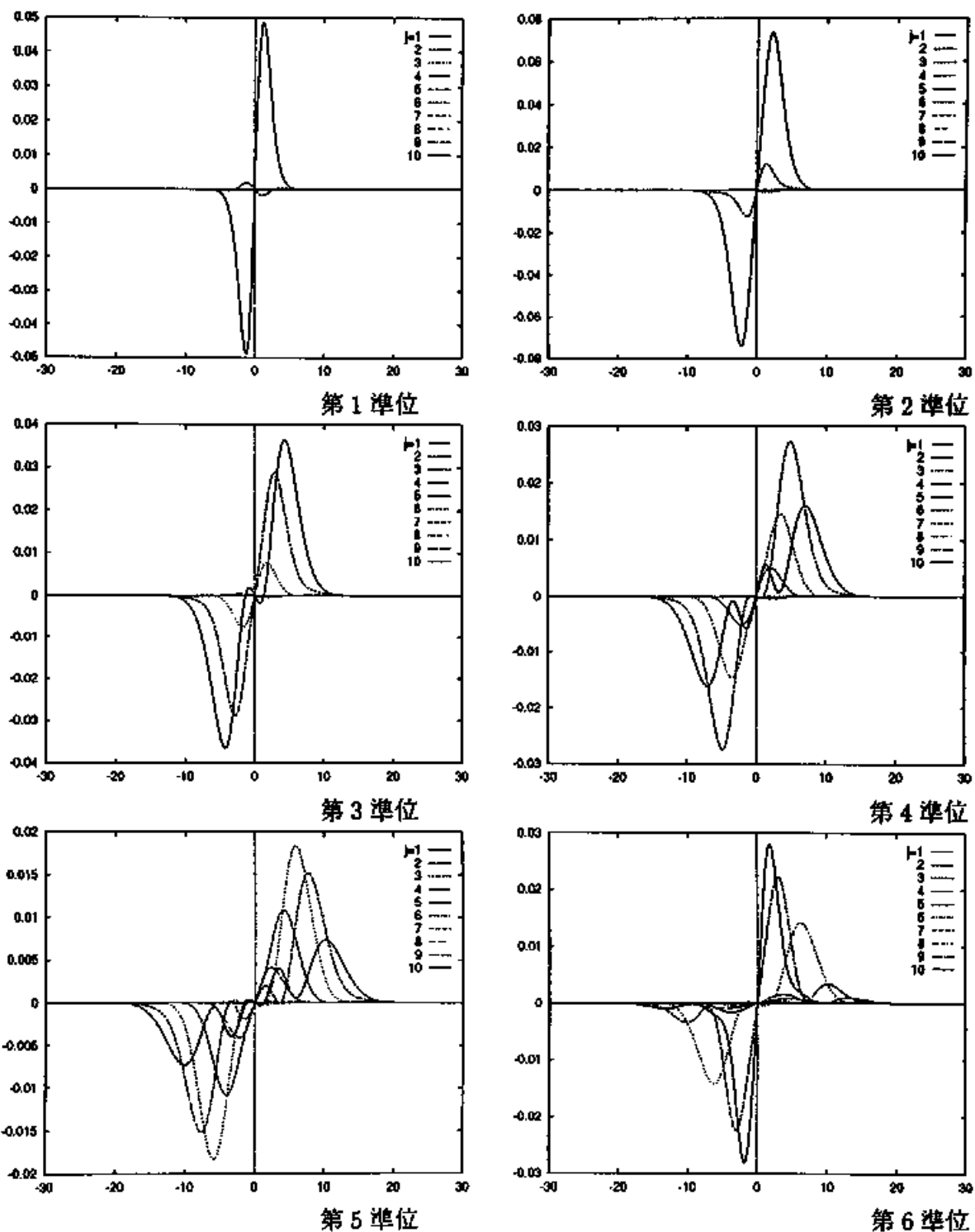


図 13: 第1準位から第6準位までの各エネルギー準位の波動関数からのペアポテンシャルへの寄与: 各層 ($j = 1, 2, \dots, 10$) での $u_j(r)v_j^*(r)$ の実部。横軸は x 。

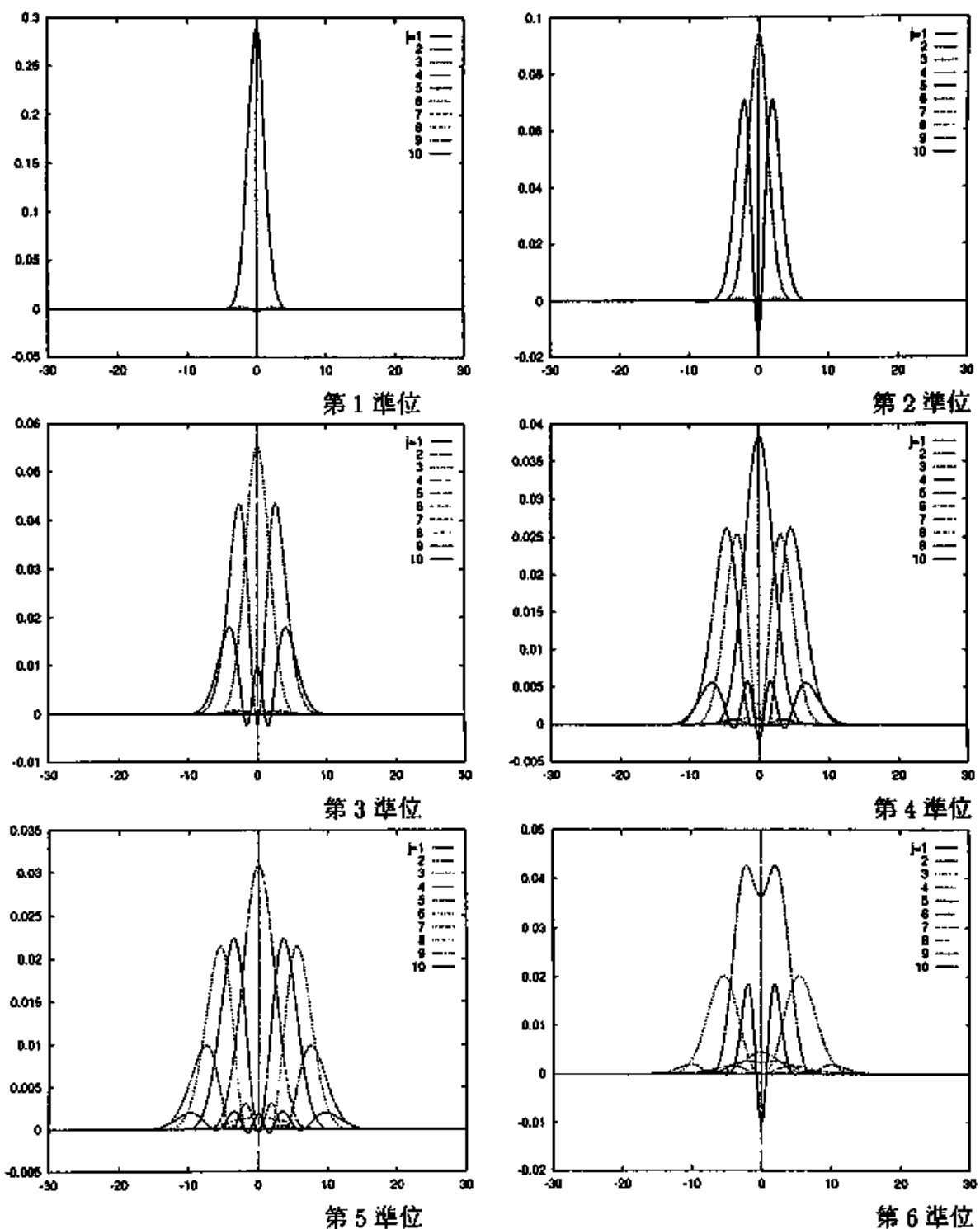


図 14: 第1準位から第6準位までの各エネルギー準位の波動関数からのペアポテンシャルへの寄与: 各層 ($j = 1, 2, \dots, 10$) での $u_e(r)v_e^*(r)$ の虚部。横軸は x 。

$$J^{(j-1 \rightarrow j)}(x, z) = -\frac{e v_F}{2i\gamma_s} \left\{ u_{e,1}^*(x, j-1, z) u_{e,1}(x, j, z) - u_{e,1}(x, j-1, z) u_{e,1}^*(x, j, z) \right. \\ \left. + u_{e,2}^*(x, j-1, z) u_{e,2}(x, j, z) - u_{e,2}(x, j-1, z) u_{e,2}^*(x, j, z) - [v \text{ の寄与}] \right\}, \quad (4.33)$$

$$u_e(r) v_e^*(r) = u_{e,1}(r) v_{e,1}^*(r) + u_{e,2}(r) v_{e,2}^*(r) \quad (4.34)$$

が得られる。第1準位から第6準位までの各準粒子励起状態について、式(4.32)-(4.34)のようすを計算した。

式(4.32)の $|\psi_e(r)|^2$ を図11に示してある。この波動関数の振幅の2乗の広がりを見ると、第1準位では層に最も近い層 ($j=1$) のみで渦糸の近くに局在していることがわかる。これが第2準位になると $j=1$ の層と $j=2$ の層にわたって局在しており、 $j=1$ の層では節が一つ、 $j=2$ の層では節なしの構造をしている。また、波動関数の局在している領域の広さも第1準位の場合に比べ広がっている。この傾向は第3-第5準位へと続いていき、第 n 準位では波動関数は $j=1 \sim n$ の層にわたって広がっており、 $j=1$ の層では節が $n-1$ 個、 $j=2$ の層では節が $n-2$ 個、...、 $j=n-1$ の層では節が1個、 $j=n$ の層では節なしという構造をしていて、準位が上がるにつれ、波動関数が局在している領域が広がっていく。ただし、第6準位より上の準位になるとこのルールははっきりしなくなる。これは数値計算の精度の問題も影響しているかもしれないが、今の状況は層間結合もある複雑な構造の場合を考えているので、波動関数のエネルギー準位を決めている要因が単に節の数だけということではなく、複雑な要因がからんでいるためと考えられる。

式(4.33)の $J^{(j-1 \rightarrow j)}(x, z)$ は図12に示してある。この層間ジョセフソン電流への各準位の固有状態からの寄与のようすを見ると、準位が上がるにつれ電流の流れる領域が外へ広がっていくのがわかる。また、第1準位では渦糸のまわりを右まわりで流れているが、第2準位では外側では右まわりだが内側では左まわりで流れており、第3準位では外側では右まわりだがその内側では左まわりになりさらにその内側では右まわりに戻るという構造は注目に値する。ただし、エネルギー準位が上がるにつれ、この傾向ははっきりしなくなる。これらの電流方向の分布は図11での波動関数の節の分布と関係ありそうである。

式(4.34)の $u_e(r) v_e^*(r)$ については実部を図13、虚部を図14に示す。この各エネルギー準位からペアポテンシャルへの寄与をみると、第1準位では渦糸の中心近くでのみの寄与だったものが、準位が上がるにつれ寄与する領域が広がってくる。こうしてエネルギー準位が低いものから順に渦糸の近くから外側へ向けて、ペアポテンシャルの構造を構成していくことが見てとれる。

4.5 d 波超伝導の場合

酸化物高温超伝導体などにおいては d 波の異方的な超伝導が実現していることがほぼ確実視されている。これまでの渦糸のまわりでの準粒子励起についての Bogoliubov-de Gennes 方

程式による議論は、 s 波超伝導の場合についてなされてきたが、この議論が d 波超伝導の場合にはどう変更されるかについて考察する。以下の式変形は基本的に アンドレーフ 散乱を考える時に用いられる手法にならったものである [17]。

異方的な超伝導においては ペアポテンシャルが非局所的な形 $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ となるので、Bogoliubov-de Gennes 方程式は

$$h_0 u(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x}' \Delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') v(\mathbf{x}') = \epsilon u(\mathbf{x}), \quad (4.35)$$

$$-h_0 v(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x}' \Delta^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') u(\mathbf{x}') = \epsilon v(\mathbf{x}), \quad (4.36)$$

$$h_0 = \frac{1}{2k_F} \left(-\partial_x^2 - \partial_z^2 - k_F^2 \right) + \text{層間の結合に関する項} \quad (4.37)$$

となる。ここで \mathbf{x}, \mathbf{x}' は位置ベクトルであり、層に垂直方向を y 軸とした。ペアポテンシャルについては以下の重心座標 \mathbf{R} と相対座標 \mathbf{r} での表示に直して考える。

$$\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \bar{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad \mathbf{r} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}, \quad \mathbf{R} = \frac{\mathbf{x}' + \mathbf{x}}{2}. \quad (4.38)$$

式 (4.35) を \mathbf{r} と \mathbf{x} の変数で考えることにすると、式 (4.38) を用いて、

$$(h_0 - \epsilon) u(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{r} \bar{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}) v(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = 0 \quad (4.39)$$

と書き直せる。式 (4.36) も同様の変形ができる。(以下、同じ。)

次に波数 k_F のはげしい振動をくくり出すため、

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \bar{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad v(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (4.40)$$

とおく。ここで $\mathbf{k} = (k_x, k_z)$, $|\mathbf{k}| = k_F$ である。アンドレーフ 散乱を考える時には入射波を考えるので特定の \mathbf{k} の方向に限った議論で良かったが、準粒子励起を考える時にはあらゆる \mathbf{k} の方向について考えなければならない。式 (4.40) を式 (4.39) に代入すると

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \left\{ (\bar{h}_0 - \epsilon) \bar{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{r} \bar{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}) \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right\} = 0, \quad (4.41)$$

$$\bar{h}_0 = \frac{1}{2k_F} \left(-\partial_x^2 - \partial_z^2 - 2ik_x \partial_x - 2ik_z \partial_z \right) + \text{層間の結合に関する項} \quad (4.42)$$

が得られる。ここで式 (4.41) の $\{ \dots \}$ 内第 2 項について次のような式変形ができる。

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r} \bar{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}) \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \int d\mathbf{r} \left(\bar{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) + \frac{\partial \bar{\Delta}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\mathbf{r}}{2} \right) \left(\bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \frac{\partial \bar{v}_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{r} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \int d\mathbf{r} \left\{ \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \left(\frac{\partial \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right) \cdot \mathbf{r} + \frac{1}{2} \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \mathbf{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right\} \bar{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \bar{\Delta}(\mathbf{k}, \mathbf{x}) \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \left\{ \frac{\partial \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} + \frac{1}{2} \bar{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right\} \frac{\partial \bar{\Delta}(\mathbf{k}, \mathbf{x})}{i\partial \mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.43)$$

最後の行に至る変形には 相対座標についてのフーリエ変換

$$\tilde{\Delta}(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \int d\mathbf{r} \tilde{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad \frac{\partial \tilde{\Delta}(\mathbf{k}, \mathbf{x})}{i\partial \mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} \mathbf{r} \tilde{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (4.44)$$

を用いた。式(4.43)の最終行第2項については、 $\partial/\partial \mathbf{x}$ は $\xi^{-1}(=1)$ のオーダーで $\partial/\partial \mathbf{k}$ は k_F^{-1} のオーダーであるから、第2項全体としては k_F^{-1} のオーダーである。よって、第1近似としてはこの第2項は無視しても良い。ただし、層に垂直な磁場の場合のように μ/k_F のオーダーの低エネルギー励起を考える時にはこの第2項も考慮に入れなければならないかもしれない。

層に平行な磁場の場合: 磁場方向を z 方向とすると、 $\tilde{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \tilde{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は z 座標に依存しない。また、 $\tilde{\Delta}$ も重心座標の z 座標には依存しない。よって、 $e^{ik_z z}$ 以外の部分は z 座標に依存しないので k_z が固有状態を指定する量子数になっている。よって、式(4.41)-(4.43)より

$$\sum_{k_z = \pm \sqrt{k_F^2 - k_{\perp}^2}} e^{ik_z z} \{ (\hbar_0 - \epsilon) \tilde{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \tilde{\Delta}(\mathbf{k}, \mathbf{x}) \tilde{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \} = 0 \quad (4.45)$$

が得られる。この式では $\{\dots\} = 0$ としてよいが、その式は s 波の場合での式(4.14)と同じ形となる。唯一変更しているのは Δ の値が \mathbf{k} に依存している点である。以上の考察より、層に平行な磁場の場合には各 k_z について s 波の場合と同様の計算ができ、各 k_z の固有状態の最低の励起エネルギーは $\Delta(\mathbf{k})$ のオーダーであることが予想される。スケール変換をしてやると、 Δ が小さくなるにつれ、実質的に、コヒーレンス長が長くなり、層間結合も強くなることがわかる。よって、 $\Delta(\mathbf{k})$ の節の方向に近い k_z では、最低の励起エネルギーが小さくなるとともに、局在する波動関数の領域も広がってくると予想される。

層に垂直な磁場の場合: 磁場は y 方向に向いており、この場合は k_y については量子数として分離できる。よって x - z 面内での渦糸の構造を考えれば良い。この状況はバルクの場合と同じである。 s 波超伝導では Δ は \mathbf{k} によらず一定値であるため、式(4.41)において円筒対称を仮定でき、動径方向のみの一次元の式に帰着できた。しかしながら、異方的な超伝導の場合は $\mathbf{k} = (k_x, k_z)$ の値により、 Δ の値が変化するので円筒対称と仮定するわけにはいかず、一次元問題に帰着できないので解を得るのが困難な状況である。また、式(4.41)において、異なる \mathbf{k} を持つ状態についても \mathbf{k} の角度がわずかに異なるだけの状態どうしは互いに重なりを持つので、単純に $\{\dots\} = 0$ と考えることは許されない。それに、層に垂直な磁場の場合には渦糸の中心近くの励起は μ/k_F のオーダーであると考えられるが、この場合式(4.43)の最終行第2項の考慮も必要になるかもしれない。直観的に考えても、Bogoliubov-de Gennes 方程式では1電子の波動関数について考察するのであるが、 d 波超伝導などの対称性の性質は2電子あってはじめて言える性質である。特に準古典近似($k_F \gg 1$)を用いると相手の電子についての情報がまったくわからなくなってしまう。この点を考えても難しい問題であることがわかる。このように垂

直な磁場の場合では Bogoliubov-de Gennes 方程式で考えた場合このように多数の困難があり、現状では この方法で d 波超伝導での準粒子励起についての考察することは 無理な状況にある。

5 渦糸格子での準粒子励起

5.1 渦糸格子での Bogoliubov-de Gennes 方程式

基本的に 渦糸格子での準粒子励起を考える時には、第4節での孤立した渦糸での計算に対して、ベクトルポテンシャルを通じて一定磁場を導入する、磁場の存在を考慮した周期境界条件をはたす、という改良をすればよい。ベクトルポテンシャルを考慮した Bogoliubov-de Gennes 方程式は 次のように書ける。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2k_F} \left\{ \left| \frac{\vec{\partial}}{i} + \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right|^2 - k_F^2 \right\} & \Delta \\ \Delta^* & -\frac{1}{2k_F} \left\{ \left| \frac{\vec{\partial}}{i} - \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right|^2 - k_F^2 \right\} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_e \\ v_e \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_e \\ v_e \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

ここで、 $\phi_0 = hc/(-2e)$ は 磁束量子である。注意すべき点は 準粒子を考える場合には 電荷が $e(<0)$ であり、クーバー対の $2e$ の半分である。これにより、ベクトルポテンシャルの前の因子は ペアポテンシャルを考えた時の因子 $2\pi/\phi_0$ に比べ、半分になっている。式 (5.1) の表式は バルクに対するものだが、層構造を考える場合には、例えば y 方向が層に垂直な方向であるとすると、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k_F} \left| \frac{\partial_y}{i} + \frac{\pi}{\phi_0} A_y \right|^2 u(j) &\rightarrow -\frac{1}{2\gamma_s} (u(j+1)e^{i\frac{\pi}{\phi_0} A_y} + u(j-1)e^{-i\frac{\pi}{\phi_0} A_y} - 2u(j)), \\ \frac{1}{2k_F} \left| \frac{\partial_y}{i} - \frac{\pi}{\phi_0} A_y \right|^2 v(j) &\rightarrow -\frac{1}{2\gamma_s} (v(j+1)e^{-i\frac{\pi}{\phi_0} A_y} + v(j-1)e^{i\frac{\pi}{\phi_0} A_y} - 2v(j)) \end{aligned} \quad (5.2)$$

と直して考えれば良い。ここで j は 層を指定する数である。今の場合典型的な第2種超伝導体を考えることにするので、磁場 H は一定であると近似でき、ベクトルポテンシャルとしては 次の三つの場合を考える。磁場の向きを x 方向とした場合、

$$\begin{aligned} \text{Lx: ランダウゲージ } (A_x \neq 0) & \quad \mathbf{A}_{\text{Lx}}(\mathbf{r}) = (-Hy, 0) \\ \text{Sy: シンメトリックゲージ} & \quad \mathbf{A}_{\text{Sy}}(\mathbf{r}) = (-\frac{1}{2}Hy, \frac{1}{2}Hx) = \frac{1}{2}\mathbf{H} \times \mathbf{r} \\ \text{Ly: ランダウゲージ } (A_y \neq 0) & \quad \mathbf{A}_{\text{Ly}}(\mathbf{r}) = (0, Hx). \end{aligned} \quad (5.3)$$

まず、ペアポテンシャルの性質について考えておく。ペアポテンシャルに対しては、ベクトルポテンシャルは

$$\frac{\vec{\partial}}{i} \rightarrow \frac{\vec{\partial}}{i} + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \quad (5.4)$$

という形に入る。よって、ベアポテンシャルに関しては、式(5.3)の各ゲージの取り方の間には次のゲージ変換で関係づけられている。

$$\begin{aligned} A_{sy} &= A_{Lx} + \tilde{\delta}f, & \Delta_{sy}(\mathbf{r}) &= \Delta_{Lx}(\mathbf{r}) \exp(-i\frac{2\pi}{\phi_0}f), \\ A_{Ly} &= A_{Lx} + 2\tilde{\delta}f, & \Delta_{Ly}(\mathbf{r}) &= \Delta_{Lx}(\mathbf{r}) \exp(-2i\frac{2\pi}{\phi_0}f). \end{aligned} \quad (5.5)$$

ここで、 $f = \frac{1}{2}Hxy$ である。渦糸格子の基本ベクトルを第3節と同様 $\mathbf{r}_1 = (a_x, 0)$, $\mathbf{r}_2 = (\zeta a_x, a_y)$ と選ぶと、 $\mathbf{R} = m\mathbf{r}_1 + n\mathbf{r}_2$ (m, n :整数)の並進変換に対しては

$$\Delta(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \Delta(\mathbf{r}) \exp(i\chi(\mathbf{r}, \mathbf{R})) \quad (5.6)$$

となる。ここで、 $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ はランダウゲージ($A_x \neq 0$)に対しては

$$\begin{aligned} \chi_{Lx}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= -\frac{2\pi}{\phi_0} H a_x a_y \left\{ -n \left(\frac{x}{a_x} + \frac{n}{2}\zeta \right) + (m + n\zeta) \frac{y_0}{a_y} - n \frac{x_0}{a_x} \right\} \\ &= -\frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{r} + \pi n^2 \zeta + \frac{2\pi}{\phi_0} (\mathbf{H} \times \mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{R}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

シンメトリックゲージに対しては

$$\begin{aligned} \chi_{sy}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \chi_{Lx}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) - f(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{2\pi}{\phi_0} H a_x a_y \left\{ \frac{1}{2} \left((m + n\zeta) \frac{y}{a_y} - n \frac{x}{a_x} \right) + \frac{mn}{2} + (m + n\zeta) \frac{y_0}{a_y} - n \frac{x_0}{a_x} \right\} \\ &= -\frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{r} - \pi mn + \frac{2\pi}{\phi_0} (\mathbf{H} \times \mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{R}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

ランダウゲージ($A_y \neq 0$)に対しては

$$\begin{aligned} \chi_{Ly}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \chi_{Lx}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + 2f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) - 2f(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{2\pi}{\phi_0} H a_x a_y \left\{ (m + n\zeta) \frac{y}{a_y} + mn + \frac{n^2}{2}\zeta + (m + n\zeta) \frac{y_0}{a_y} - n \frac{x_0}{a_x} \right\} \\ &= -\frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{r} - \pi n^2 \zeta + \frac{2\pi}{\phi_0} (\mathbf{H} \times \mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{R} \end{aligned} \quad (5.9)$$

である。ここでは単位格子あたり磁束1本が通っている場合を考えているので、 $H a_x a_y = \phi_0$ の関係がある。また、 $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ は単位格子の中での渦糸の中心の位置に関するパラメーターである。一様な物質の場合 $\mathbf{r}_0 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ の位置に渦糸の中心が存在する。

次に波動関数 u, v についての並進変換を考える。 $\mathbf{r} + \mathbf{R}$ の位置での式(5.1)においてどのような変換を行えば \mathbf{r} の位置での式(5.1)の形が得られるかを考えると並進変換の表式が求められる。この時定数因子の自由度が残るが、 \mathbf{R} の並進変換を分解して考えた時にも(例えば $m\mathbf{r}_1$ の並進変換の後 $n\mathbf{r}_2$ の並進変換をする、またはその逆の順で変換するというふうに考える)波動関数の位相の変化が一意的に決まるという条件を考慮するとその定数因子は $\exp(ip \cdot \mathbf{R})$ という形になる。よって、波動関数 u, v についての並進変換は

$$\begin{aligned} u_e(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= u_e(\mathbf{r}) \exp \left(\frac{i}{2} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + ip \cdot \mathbf{R} \right), \\ v_e(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= v_e(\mathbf{r}) \exp \left(-\frac{i}{2} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + ip \cdot \mathbf{R} \right) \end{aligned} \quad (5.10)$$

となることがわかる。式(5.10)における \mathbf{p} は 磁気ブロッホ状態の準運動量に相当している。渦糸が格子を組んだ場合、準粒子励起がバンドを形成すると考えられるが、この \mathbf{p} がその際の運動量の役割を果たす。さらに、

$$\begin{aligned} u_{\epsilon}(\mathbf{r}) &= u_{\epsilon,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \\ v_{\epsilon}(\mathbf{r}) &= v_{\epsilon,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (5.11)$$

と おくと、式(5.1) と式(5.10) は

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2k_F} \left\{ \left| \frac{\tilde{\partial}}{i} + \mathbf{p} + \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right|^2 - k_F^2 \right\} & \Delta \\ \Delta^* & -\frac{1}{2k_F} \left\{ \left| \frac{\tilde{\partial}}{i} + \mathbf{p} - \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right|^2 - k_F^2 \right\} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\epsilon,\mathbf{p}} \\ v_{\epsilon,\mathbf{p}} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_{\epsilon,\mathbf{p}} \\ v_{\epsilon,\mathbf{p}} \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} u_{\epsilon,\mathbf{p}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= u_{\epsilon,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{i}{2}\chi(\mathbf{r}, \mathbf{R})\right) \\ v_{\epsilon,\mathbf{p}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= v_{\epsilon,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{2}\chi(\mathbf{r}, \mathbf{R})\right) \end{aligned} \quad (5.13)$$

となる。数値計算などでは式(5.13)を 周期境界条件として用いる。

なお、この式(5.13)を使う時には 一つ注意が必要である。これは、式(5.13)の変換により、単位格子を一周して元の位置に戻ってきた場合(つまり、 \mathbf{r}_1 の並進 $\rightarrow \mathbf{r}_2$ の並進 $\rightarrow -\mathbf{r}_1$ の並進 $\rightarrow -\mathbf{r}_2$ の並進と4回の変換をした場合)、 u の得る位相は $-\pi$ 、 v の得る位相は π であり、これでは波動関数 u, v が1価関数でなくなってしまう。この点を回避するため、 u, v を計算する場合には 渦糸格子の単位格子二つ分を単位格子として計算するとしなければならない。単位格子二つ分をまわって戻ってくれば u の得る位相は -2π 、 v の得る位相は 2π であり、1価性は満たされる。このことは、クーバー対では電荷が $2e$ だが準粒子では電荷は e と半分であり、このため準粒子にとっての磁束量子は ϕ_0 の2倍となり、よって準粒子を考える時の単位格子の広さは ペアポテンシャルを考える時の単位格子の広さの2倍が必要であるということを反映した事実である。

5.2 平行磁場の場合の数値計算の現状

式(5.12),(5.2)に対して 第4節と同様の 準古典近似をすることを考える。波動関数において波数 k_F のはげしい振動を抜き出すため、式(5.12)の $u_{\epsilon,\mathbf{p}}, v_{\epsilon,\mathbf{p}}$ を式(4.12)のようにおく。そして式(5.2)も考慮すると、層に平行な磁場の場合、ゆっくり変化する関数 $u_{\epsilon,\mathbf{p},1}, v_{\epsilon,\mathbf{p},1}$ についての式として、

$$\begin{aligned} & \sqrt{1 - (k_z/k_F)^2} \left(\frac{\partial_x}{i} + p_x + \frac{\pi}{\phi_0} A_x \right) u_{\epsilon,\mathbf{p},1}(x, j) \\ & - \frac{1}{2\gamma_s} \left(u_{\epsilon,\mathbf{p},1}(x, j+1) e^{i(p_y + \frac{\pi}{\phi_0} A_y)x} + u_{\epsilon,\mathbf{p},1}(x, j-1) e^{i(p_y - \frac{\pi}{\phi_0} A_y)x} - 2u_{\epsilon,\mathbf{p},1}(x, j) \right) \\ & + \Delta(x, j) v_{\epsilon,\mathbf{p},1} = \epsilon u_{\epsilon,\mathbf{p},1}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned}
& -\sqrt{1-(k_x/k_F)^2} \left(\frac{\partial_x}{i} + p_x - \frac{\pi}{\phi_0} A_x \right) v_{\epsilon, p, 1}(x, j) \\
& + \frac{1}{2\gamma_s} \left(v_{\epsilon, p, 1}(x, j+1) e^{i(p_y - \frac{\pi}{\phi_0} A_y)x} + v_{\epsilon, p, 1}(x, j-1) e^{i(p_y + \frac{\pi}{\phi_0} A_y)x} - 2v_{\epsilon, p, 1}(x, j) \right) \\
& + \Delta^*(x, j) u_{\epsilon, p, 1} = \epsilon v_{\epsilon, p, 1}
\end{aligned} \tag{5.15}$$

が得られる。式(5.14),(5.15)におけるペアポテンシャル $\Delta(x, j)$ としては、第3節で行なった渦糸格子のペアポテンシャルを数値緩和法で求める方法により計算して得られた結果の値を用いる。準粒子固有状態を式(5.14),(5.15)から求める方法としては、第4節と同様の方法、つまり、 ϵ^2 を最小にするような数値緩和法(4.15)を用いて計算する。この数値計算は渦糸格子の単位格子二つ分の領域について行ない、境界条件としては磁場中の周期境界条件(5.13)を用いる。ただし、ここでの注意点としては、 $A_x \neq 0$ のゲージを用いると式(4.22),(4.23)のような非物理的な解の方が正しい解よりエネルギーが低いとみえて、結果が、常に、非物理的な解となってしまう。これを回避するためには $A_x = 0$ となるゲージLyで計算を行なわなければならない。

実際の数値計算では物質パラメーターとしては第4節と同じ値 $\gamma_s = 2.5$ を用い、8層周期の渦糸格子の場合($a_y = 8s, a_x = 8s \times 2\gamma/\sqrt{3}$)の計算を行なった。数値緩和法(4.15)の結果、 ϵ^2 の固有状態としては十分に収束した結果が得られた。このときの固有エネルギーの値は $|\epsilon| = 0.63$ となり、孤立した渦糸での結果と同じ値になった。準運動量 p についてもいくつか値を変えて計算を行なったが、いずれも $|\epsilon| = 0.63$ と同じ値の固有エネルギーとなった。これは Δ_0 のエネルギースケールから見れば、渦糸格子での準粒子のバンドの分散関係の p 依存性は $\epsilon = \text{一定}$ と見なして良いほどフラットに近いということを示唆している。

こうして ϵ^2 最小の状態を求めるところまではうまくできたように見えるが、しかしながら、次の段階の ϵ の状態と $-\epsilon$ の状態の重ね合わせの状態から正の固有値 ϵ の状態を抜き出す操作(4.16)がうまくいかず、最終的な結果が得られないのが現状である。式(4.16)の操作を行なった後に得られる状態は、なぜか固有値が $|\epsilon| = 0.63$ より大きな値となってしまう、また、波動関数の形状は式(4.22)のような非物理的な解の形をしている。渦糸格子の単位格子二つ分にわたって広がっている状態においては、エネルギー最小の状態にも二つの状態が縮退している(またはそれに近い状態にある)と予想される。このような状況では数値緩和法がうまく機能する保証はない。さらに、 x 方向を離散化して考える時には式(4.22),(4.23)のような非物理的な解が混ざってくるという事実も絡んで、数値緩和法で渦糸格子での準粒子励起を求めることを困難にしていると考えられる。

5.3 バルクの場合でのいくつかの考察

バルクの場合 または 層に垂直な磁場の場合、孤立した渦糸については先に述べたように Caroli らの解析的な計算が成功している [6]。ここでは、この計算が渦糸格子の場合にどうなるかについて議論する。

円筒対称でないための困難: まず最初に困難に当たるのは、渦糸格子の場合は円筒対称でないという事実であり、単純に動径方向のみの方程式に帰着させることはできない点である。確かに渦糸の芯領域では円筒対称な構造となっていると考えられるから動径方向と角度方向に分離して考えることが可能かもしれないが、こうして考えて得た波動関数も渦糸の外側領域まで裾をひいて広がっており渦糸格子の単位格子の境界において隣の渦糸での波動関数と連続につながらなくてはならない。この単位格子の境界近くでは、動径方向と角度方向に分けて考えるというのは良い方法ではなく、このような状況をどのように考えるかが問題である。特に、考えている準粒子波動関数は波数 k_F で はげしく振動しているので、このはげしい振動を渦糸芯での円筒対称な構造から渦糸芯の外の単位格子の境界領域へ無理なく移行させ、かつ、境界のすべての場所で隣の渦糸での波動関数と連続につながりということを式で表現することは絶望的である。数値計算をするにしても k_F の振動は離散化して考える格子点の間隔より細かい振動であり、よって数値計算で扱うのも困難な状況にある。

通常、 k_F の はげしい振動を扱うためには準古典近似が使われる。準古典近似では $e^{ik \cdot r}$ ($|k| = k_F$) の振動をくり出すと、それにかかる包絡関数はゆっくりと変化するのでこの包絡関数について考えるという手法を用いる。しかしながら、ここで k の方向 \hat{k} をどう選ぶかが問題となる。Caroli らの孤立渦糸についての議論では円筒対称であったのですべての \hat{k} が同等であり、問題なく先へ進めた。しかし、渦糸格子の場合には単位格子の形との関係で \hat{k} の方向により (特に単位格子の境界付近での) 状況が異なってくるので、各 \hat{k} の場合について別々に考えなければならない。また、この \hat{k} は連続的に変化するので、異なる \hat{k} の状態どうしも \hat{k} の角度がわずかにしか違わない状態どうしは混ざり合う。この混ざり合いまで考慮に含めて計算するのは非常に困難といえる。

波動関数の位相の渦糸のまわりでの巻き数について: ここまでは円筒対称性が使えないため、渦糸格子での準粒子励起の計算が困難となっていることについて述べてきた。次は準粒子波動関数の位相の渦糸のまわりでの巻き数についての考察を行なう。孤立渦糸においてはこの渦糸のまわりでの巻き数は準粒子励起のエネルギー準位を指定する量子数であり、エネルギー $\mu \Delta_0^2 / E_F$ ($\mu = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$) の状態での渦糸のまわりの巻き数は u では $\mu - \frac{1}{2}$ 回、 v では $\mu + \frac{1}{2}$ 回という関係があった。しかしながら、巻き数によるエネルギー準位の指定という概念は渦糸格子の場合には成り立っていない。この点について以下に議論する。

ペアポテンシャルの $\Delta(\mathbf{r})$ の位相を $-\psi(\mathbf{r})$ とし、

$$\Delta(\mathbf{r}) = |\Delta(\mathbf{r})| e^{-i\psi(\mathbf{r})} \quad (5.16)$$

と書く。波動関数 u, v を

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}) &= \bar{u}_\mu(\mathbf{r}) e^{i(\mu - \frac{1}{2})\psi(\mathbf{r})}, \\ v(\mathbf{r}) &= \bar{v}_\mu(\mathbf{r}) e^{i(\mu + \frac{1}{2})\psi(\mathbf{r})} \end{aligned} \quad (5.17)$$

と変換すると、式(5.16)も用いて、式(5.1)の Bogoliubov-de Gennes 方程式は

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k_F} \left\{ \left| \frac{\tilde{\partial}}{i} + \left(\mu - \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{\partial}\psi - \frac{2\pi}{\phi_0} A \right) + \mu \frac{2\pi}{\phi_0} A \right|^2 - k_F^2 \right\} \bar{u}_\mu + |\Delta| \bar{v}_\mu &= \epsilon \bar{u}_\mu, \\ -\frac{1}{2k_F} \left\{ \left| \frac{\tilde{\partial}}{i} + \left(\mu + \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{\partial}\psi - \frac{2\pi}{\phi_0} A \right) + \mu \frac{2\pi}{\phi_0} A \right|^2 - k_F^2 \right\} \bar{v}_\mu + |\Delta| \bar{u}_\mu &= \epsilon \bar{v}_\mu \end{aligned} \quad (5.18)$$

となる。この式において、ペアポテンシャルの振幅 $|\Delta|$ および電流に比例した量 $\tilde{\partial}\psi - \frac{2\pi}{\phi_0} A$ は周期的な量であり、どの単位格子内においても等価な点どうしの値は同じとなる。そして、式(5.18)において格子並進 \mathbf{R} の変換を考えると、

$$\begin{aligned} \bar{u}_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \bar{u}_\mu(\mathbf{r}) e^{-i\mu \frac{2\pi}{\phi_0} A(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{r} + ic}, \\ \bar{v}_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \bar{v}_\mu(\mathbf{r}) e^{-i\mu \frac{2\pi}{\phi_0} A(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{r} + ic} \quad (c: \text{定数}) \end{aligned} \quad (5.19)$$

という関係が得られ、これが周期境界条件の役割を果たす。

まず、 $\mu = 0$ の場合を考える。この変換はペアポテンシャルを実数とするゲージ変換である。この場合には式(5.18)が渦糸格子について周期的な構造となり、周期境界条件も $\bar{u}_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \bar{u}_\mu(\mathbf{r})$, $\bar{v}_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \bar{v}_\mu(\mathbf{r})$ となって、磁場のない場合と同じ形となる。このような \bar{u}_μ, \bar{v}_μ を求めることは非常に扱いやすい問題のように思える。しかしながら、この方法には重大な問題がある。式(5.17)を見ると \bar{u}_μ, \bar{v}_μ は扱いやすい関数であるが、それにかかる $e^{\mp i\frac{1}{2}\psi}$ は困った性質を持っている。 $e^{\mp i\frac{1}{2}\psi}$ は渦糸のまわりを一周して戻ってくると得られる位相が $\mp\pi$ であり、よって u, v が 1 価関数でなくなってしまう。このため $\mu = 0$ として考えることはできない。

実はこのような状況は孤立渦糸の場合にも存在しており、この困難を回避するため、さらに $e^{i\mu\psi}$ (μ : 半整数) という因子をかけ、 $e^{i(\mu \mp \frac{1}{2})\psi}$ という形にして、 u, v が 1 価関数であることを保証した変換をしていた。よって、式(5.17)でも μ が半整数の変換を考える。孤立渦糸の場合は無限遠で $u, v \rightarrow 0$ が境界条件であったので問題がなかったが、渦糸格子の場合は周期境界条件(5.19)を考えなければならず、ここで問題が起こる。式(5.19)にしたがって渦糸格子の単位格子のまわりを一周すると(つまり、 \mathbf{r}_1 の並進 $\rightarrow \mathbf{r}_2$ の並進 $\rightarrow -\mathbf{r}_1$ の並進 $\rightarrow -\mathbf{r}_2$ の並進と 4 回の変換をした場合) \bar{u}_μ, \bar{v}_μ について得られる位相は $\mu 2\pi$ である。このとき、 $e^{i(\mu \mp \frac{1}{2})\psi}$ により得られる位相は $(\mu \mp \frac{1}{2})2\pi$ であるから、両者を合わせると、単位格子を一周して得られる u, v の位相は結局 $\mp\pi$ である。このことは、たとえ渦糸の中心で位相の巻き数が $\mu \mp \frac{1}{2}$ の状況を考えても、単位格子の境界領域に至るまでに位相の巻き数に変化が起こり、隣の単位格子との境界では位相の巻き数が $\mp\frac{1}{2}$ とならなければいけないことを示している。このような状況では巻き数によりエネルギー準位を指定するのは無理と考えられる。また、渦糸格子一つ分を準粒子状態の単位格子として考える限りにおいては、どのような変換をしても単位格子を一周したら u, v の得る位相は $\mp\pi$ であるという状況は変わらないということを示している。この議論で単位格子

を一周したら u, v の得る位相は $\mp\pi$ であるという状況であるが、これでは波動関数の 1 価性が満たされない。よって、渦糸格子二つ分を準粒子状態の単位格子として考えなければならないことを示唆している。このような渦糸格子二つ分を単位格子として考えた場合でも、各渦糸格子の渦糸中心で巻き数が $\mu \mp \frac{1}{2}$ である状況を考えても、単位格子の境界領域に至るまでに巻き数が変化し、渦糸格子二つ分を一周すると u, v の得る位相が $\mp 2\pi$ であるという状態にならない。よって、 μ によりエネルギー準位が指定できないという状況には変わりはない。このような巻き数の変化が起こるためには渦糸の中心以外にも位相の特異点が存在すると予想される。

準粒子の単位格子の取り方について：これまでの考察により準粒子励起を考える時には渦糸格子二つ分の領域を単位格子として考えなければならないことがわかった。そこでこの渦糸格子二つ分の取り方はどうしたら良いか？ということが問題となるが、以下の議論をすればその解答が得られる。波動関数 u, v と Δ の関係はセルフコンシステントの条件より

$$\Delta(r) = |g| \sum_{\epsilon} v_{\epsilon}^*(r) u_{\epsilon}(r) (1 - f(\epsilon)) \quad (5.20)$$

で与えられる。ここで $|g|$ は引力の大きさ、 $f(\epsilon)$ はフェルミ分布関数である。波動関数 u, v については次のように磁気ブロッホ状態 (Eilenberger の固有関数) で展開して考える。

$$u_{\epsilon}(r) = \sum_{N, r_0} u_{N, r_0}^{(\epsilon)} \psi_N^{(a_H)}(r|r_0), \quad v_{\epsilon}^*(r) = \sum_{N, r_0} v_{N, r_0}^{(\epsilon)*} \psi_N^{(a_H)}(r|-r_0). \quad (5.21)$$

ここで $\psi_N^{(a_H)}(r|r_0)$ は準粒子についての単位格子を考えた場合 (そのときの磁気長を a_H とする) の磁気ブロッホ状態で、 N はランダウ準位についての指標、 r_0 は準運動量 p と $p = r_0 \times \hat{z}$ という関係で結ばれたパラメーターで単位格子内の位置座標の値のみを取りうる。このときの単位格子の基本ベクトルは $r_1 = (a_x, 0)$, $r_2 = (\zeta a_x, a_y)$, ($2\pi a_H^2 = a_x a_y$) であるとしておく。なお、磁気ブロッホ状態の積については次のような公式がある。

$$\psi_N^{(a_H)}(r|r_0) \psi_M^{(a_H)}(r'|r'_0) = \sum_j D_j^{N, M} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_j^{(a_H/\sqrt{2})} \left(\frac{r+r'}{2} \middle| \frac{r_0+r'_0}{2} \right) \psi_{N+M-j}^{(\sqrt{2}a_H)}(r-r'|r_0-r'_0), \quad (5.22)$$

$$D_j^{N, M} = \sqrt{\frac{j!(N+M-j)!N!M!}{2}} \sum_{m=0}^j \frac{(-1)^{M-m}}{(j-m)!(N-(j-m))!m!(M-m)!}. \quad (5.23)$$

ここで $\psi_j^{(a_H/\sqrt{2})}$ は面積が元の半分になった単位格子での磁気ブロッホ状態で、その基本ベクトルは $r_1 = (a_x, 0)$, $r_2 = (\frac{1}{2}\zeta a_x, \frac{1}{2}a_y)$ となっており、単位格子の形状は元の単位格子を y 方向で半分にした形をしている。一方、 $\psi_j^{(\sqrt{2}a_H)}$ は面積が元の倍になった単位格子での磁気ブロッホ状態で、その基本ベクトルは $r_1 = (2a_x, 0)$, $r_2 = (\zeta a_x, a_y)$ となっており、単位格子の形状は元の単位格子を x 方向に 2 倍にした形をしている。式 (5.21) を式 (5.20) に代入し、式 (5.22) を用

いると、

$$\Delta(\mathbf{r}) = \sum_{j, \mathbf{r}_0} \Delta_{j, \mathbf{r}_0} \psi_j^{(a_H/\sqrt{2})}(\mathbf{r}|\mathbf{r}_0), \quad (5.24)$$

$$\Delta_{j, \mathbf{r}_0} = |g| \sum_{\epsilon} \left(1 - f(\epsilon)\right) \sum_{N, M, \mathbf{r}'_0} \frac{1}{\sqrt{2}} v_{N, \mathbf{r}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{r}'_0}^{(\epsilon)*} u_{N, -\mathbf{r}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{r}'_0}^{(\epsilon)} \psi_{N+M-j}^{(\sqrt{2}a_H)}(0|\mathbf{r}'_0) \quad (5.25)$$

が得られる。式 (5.24) は ペアポテンシャルを ペアポテンシャルについての磁気ブロッホ状態 $\psi_j^{(a_H/\sqrt{2})}(\mathbf{r}|\mathbf{r}_0)$ で展開した形となっている。このペアポテンシャルについての磁気ブロッホ状態の単位格子は、準粒子での単位格子に比べ、 y 方向で半分に切った形となっている。よって、逆にいえば、準粒子励起を考える時の単位格子のとり方については、渦糸格子の単位格子を y 方向に二つ分取ったものを単位格子として考えるべきだと言える。

6 まとめ および 今後の展望

本研究では層状超伝導体に平行に磁場をかけた時の渦糸構造 および そこでの準粒子励起状態について、孤立した渦糸の場合と渦糸格子の場合の両方を考察した。

平行磁場の場合は 層間結合をまともに扱わねばならず、解析的な計算は簡単ではなく、これまでは おおざっぱな議論が行なわれるのみであった。これに対して、本研究では 数値緩和法を用いることにより 渦糸構造や 低エネルギーの準粒子励起状態を具体的に求めるという方針で研究を進めた。数値緩和法は これまで GL 方程式から 渦糸構造を求めるため使われていた方法であるが、本研究により Lawrence-Doniach 理論から渦糸構造を求める場合にも適用でき、十分に威力を発揮することが具体的に示されたのは新しい。この計算方法によれば 磁化などの物理量を実験と比較可能な形で提供することも可能となった。また、平行磁場での準粒子励起状態の問題は 渦糸構造の問題以上に 扱う式が複雑で、これまでの研究は皆無であったが、この問題に対しても Bogoliubov-de Gennes 方程式に数値緩和法を適用して計算する方法を開発し、低エネルギーの励起状態について 具体的に 固有エネルギーおよび その波動関数を求められることを示したことは画期的な成果と言える。このように、層状超伝導体の渦糸構造に関する研究において、数値的に 具体的構造を求めるという計算方法があることを示した意義は大きく、この方法を用いることにより、層状超伝導体の渦糸の研究に新たな発展があることが期待される。

この計算方法を用いて 本研究で得られた 主な結果については 以下に列挙しておく。

○ 平行磁場での 孤立した渦糸の構造について

- ペアポテンシャルの振幅は YBCO のパラメーターの場合、渦糸の中心に最も近い層においても Δ_0 の数割程度までしか減少しない。
- この減少が見られる渦糸芯の領域はジョセフソン長のオーダーである。

◇ 平行磁場での 渦糸格子の構造について

- 磁場があまり強くない時には、孤立渦糸の場合と同様、ペアポテンシャルの振幅は YBCO のパラメーターの場合、渦糸の中心に最も近い層においても Δ_0 の数割程度までしか減少せず、この減少が見られる渦糸芯の領域はジョセフソン長のオーダーであることがわかった。
- 磁場が強い時 (渦糸間の間隔がジョセフソン長より短いような状況) では、ペアポテンシャルの振幅は 層全体にわたってほぼ一定である。ただし、振幅の大きさは Δ_0 より小さい。
- 磁場が変化した時に 渦糸格子の異なる周期の格子構造の間で起こる一次転移について具体的な評価を行ない、また、Lawrence-Doniach 理論から期待される 磁化の磁場依存性を計算した。この磁化曲線には 一次転移による振動が見られるが、磁場があまり強くない時には $H^{-1/2}$ でプロットすると周期的な振動となる。しかし、磁場が強い領域では この周期的なふるまいからのずれが見られる。

◇ 孤立した渦糸での準粒子励起について

- 平行な磁場の場合でも 渦糸のまわりに束縛された準粒子励起状態が存在することが示された。
- この束縛状態の固有エネルギーは Δ_0 のオーダーの値であり、バルクや垂直磁場の場合の Δ_0^2/E_F とは 対照的な結果であることが示された。
- 下から数個の準位の束縛状態に注目すると、準位が上がるにつれ、波動関数の節が増えていくこと、その準位の固有状態が運ぶ層間ジョセフソン電流が 場所により向きを変えたりするなど 興味深い構造が見られた。
- d 波超伝導の場合も平行磁場の場合なら これまでの計算方法が適用できる。

渦糸格子の準粒子励起については、ペアポテンシャルでの単位格子の二つ分を準粒子を考える時の単位格子として考えなければならない。このような状況では 数値緩和法の方法がうまく機能せず、結果は得られなかった。これは 単位格子の中に渦糸が二つある状況を考えているので二つの状態が最低エネルギーの状態として縮退 (または それに近い状態) しているためと考えられる。また、バルクの場合でも 孤立した渦糸の場合での結果が そのまま簡単に渦糸格子の場合に適用できるわけではないと言える。

最後に 今後の展望について述べる。渦糸構造については このあと 層に対して斜めの角度で磁場をかけた場合の渦糸格子の構造を求める問題が残されている。この場合については これまで 層間結合の弱い極限での議論があり、tilted lattice から combined lattice への一次転移な

ど興味深い現象が提起されている [5]。我々の用いてきた数値緩和法による計算もまた この斜め磁場の場合に容易に適用できると思われ、彼らの提起した現象を具体的な数値計算により検証することが課題であると言える。我々の数値計算の長所としては、必ずしも層間結合の弱い極限という近似を必要としないので、YBCO のように層間結合がそれほど弱くない物質や温度が上がって層に垂直方向のコヒーレンス長が層間隔と同程度 (または それ以上) になったような状況に対しても適用できる点が挙げられる。また、我々の数値計算では (特定の近似が適用できる状況に限るといったこともなく) 磁化などの物理量の振舞いを具体的に計算できることも長所である。このような長所もあって、我々の数値計算を用いれば Lawrence-Doniach 理論から予測される 磁場が平行または斜めにかけられた場合の物理量の振舞いを具体的に実験と比較可能な形で提供できる。今後、この数値計算の結果と 実験データの比較がなされることにより、Lawrence-Doniach 理論の妥当性も含めて、層状超伝導体における渦糸構造の理解が進むと期待される。

準粒子励起状態に対しての数値緩和法を用いたアプローチは本研究では非常に威力を発揮したが現状では限界に達しており ほぼ一段落したと言える。本当は Lawrence-Doniach 理論の妥当性を考えるという意味からも Bogoliubov-de Gennes 方程式 (または準粒子状態を考える別の理論) をセルフ コンシステントに解いて 層に平行な磁場の場合の渦糸構造を決定する計算が求められているが、このためには新たなアプローチ方法を見つけ出さなければならない。実験においては STM などにおいて 平行磁場の場合の渦糸の像が観測されることが期待される。エネルギーギャップは Δ_0 より やや小さい程度で、渦糸芯の領域はコヒーレンス長よりも長くジョセフソン長のオーダーであるという渦糸芯の像が見られるはずである。

準粒子励起状態についてはバルクや層に垂直な磁場の場合においても重要な問題が残されている。これらは方法としては必ずしも Bogoliubov-de Gennes 方程式にこだわる必要はなく別の方法を用いても良いが、解明されることが求められている問題である。一つは 渦糸格子での準粒子励起についてである。渦糸格子での準粒子状態を理解することは 超伝導体中で観測される de Haas-Van Alphen 振動の理解のためにも必要であると考えられている。この問題に対して、Bogoliubov-de Gennes 方程式による方法では 第 5 節で説明した理由により 答を得るのが難しい状況にある。この他の方法としては、Eilenberger 方程式による準古典的な計算による方法がある [18]。この方法では 渦糸構造はセルフコンシステントに 求まっているが、状態密度の完全な計算は まだなされていない。この他、Bogoliubov-de Gennes 方程式を 磁気フロホ状態 (ランダウ準位) で展開して計算を行なう試み [19]、引力ハバード模型から出発して Bogoliubov-de Gennes 理論で計算するという試み [20] もあるが、超伝導に寄与する準粒子のランダウ準位の数や、渦糸格子の単位格子一つ分の領域の中にある原子の格子点の数が現実の系よりも少ない状況でしか計算できないというのが現状である。

もう一つの問題は d 波超伝導での準粒子励起についてである。酸化物超伝導体が d 波超伝

導であることがほぼ確定的となった今、 s 波の場合と d 波の場合での渦糸のまわりでの準粒子状態の違いがどう現れるかという点が注目されている。この問題に対して、Bogoliubov-de Gennes 方程式による方法では第4節の最後で説明した理由により答を得るのが難しい状況にある。別のアプローチとしては、Eilenberger 方程式による準古典的な計算では孤立した渦糸の場合については渦糸構造が求められ、状態密度も計算されて一つの解答を与えている [1]。ただし、この方法だと準粒子固有状態のエネルギー準位の離散化については議論できない。その他、引力ハバード模型から出発して Bogoliubov-de Gennes 理論で計算するという試みもある [21]。

近年の物質生成の技術や STM など実験技術などのめざましい発達により、これらの準粒子励起についても実際に観測することが可能になってきた。この意味でも準粒子励起状態の研究は今後ますます重要になると考えられる。

謝辞

恒藤 敏彦 先生にはこの研究テーマのきっかけを与えて下さり、その後も議論などを通じて有益なアイデアを多数お教え頂きました。特に準粒子励起に関する部分は先生の存在なしにはこのような成果を得るには至らなかったと思います。また、藤田 利光 先生には研究の初期段階で層状超伝導体に平行磁場をかけた場合の孤立渦糸の渦糸構造を数値緩和法で求める方法をお教え頂きました。大見 哲巨 先生、山田 耕作 先生、町田 一成 先生、後藤 章 先生、池田 隆介先生、そして物性理論研究室の皆様には度々有益な議論をして頂き、また、貴重な助言、励ましの言葉を頂くなど大変お世話になりました。最後になりましたが、感謝の意を表し、御礼申し上げます。

A 付録

A.1 バルクの場合の準粒子の固有状態の計算

計算に先だって、まず円柱関数の性質について述べておく。円柱関数は

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{du}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) u = 0 \quad (\nu: \text{定数}) \quad (\text{A.1})$$

の解として与えられる。このうち、 $z=0$ で発散しないものを Bessel 関数 (または、第1種円柱関数) $J_\nu(z)$ とし、それに直交する関数を Neumann 関数 (または、第2種円柱関数) $N_\nu(z)$ とする。これらを用いて、Hankel 関数 (または、第3種円柱関数) $H_\nu^{(1)}(z)$, $H_\nu^{(2)}(z)$ は

$$H_\nu^{(1)}(z) = J_\nu(z) + iN_\nu(z), \quad H_\nu^{(2)}(z) = J_\nu(z) - iN_\nu(z) \quad (\text{A.2})$$

と定義される。 $z \gg 1$ の漸近的な振舞いは

$$J_\nu(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z + \frac{\nu}{2z} - \frac{2\nu+1}{4}\pi\right), \quad (\text{A.3})$$

$$H_\nu^{(1)}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp(z + \frac{\nu}{2z} - \frac{2\nu+1}{4}\pi) \quad (\text{A.4})$$

である。

次に式(4.4) から 固有状態を求め、固有エネルギーの表式(4.6)を導出する計算について述べる。渦糸の中心部分 $r < r_c$ においては、 $\Delta = 0$ とできる。よって、式(4.4)の解を $r = 0$ で発散しないという条件の下で求めると、Bessel 関数 J を用いて 次のように書ける。

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} f_+ \\ f_- \end{pmatrix}, \quad f_\pm(r) = A_\pm J_{\mu \mp \frac{1}{2}}((k_F \sin \alpha \pm q)r). \quad (\text{複号同順}) \quad (\text{A.5})$$

ここで A_\pm は定数で、 $q = \epsilon k_F / \sin \alpha$ である。

一方、渦糸の中心から離れた場所 $r > r_c$ においては、Hankel 関数 H を用いて

$$\hat{f} = \hat{g}(r) H_m(k_F r \sin \alpha) + \text{c.c.} \quad (\text{A.6})$$

とおく。ここで $m = \sqrt{\mu^2 + \frac{1}{4}}$ で \hat{g} は ゆっくりと変化する包絡関数である。式(A.6)を式(4.4)に代入すると、 $k_F^{-1} \ll 1$ を用いて

$$-i\sigma_z \sin \alpha \frac{d\hat{g}}{dr} + \Delta \sigma_z \hat{g} = \left(\epsilon + \frac{\mu}{2k_F r^2} \right) \hat{g} \quad (\text{A.7})$$

が得られる。 $\epsilon \ll 1, \mu/2k_F r^2 \ll 1$ の場合には 右辺を摂動として解くと \hat{g} として

$$\hat{g} = \text{定数} \times \begin{pmatrix} e^{i\psi/2} \\ -ie^{-i\psi/2} \end{pmatrix} e^{-K}, \quad (\text{A.8})$$

$$K(r) = \frac{1}{\sin \alpha} \int_0^r \Delta(r') dr', \quad (\text{A.9})$$

$$\psi(r) = - \int_r^\infty \exp\{2K(r) - 2K(r')\} \left(2q + \frac{\mu}{k_F r'^2 \sin \alpha} \right) dr' \quad (\text{A.10})$$

が得られる。

最後に $r < r_c$ での解(A.5)と $r > r_c$ での解(A.6)が $r = r_c$ で連続につながるという条件を果たす。 $r_c \gg k_F^{-1}$ であるので、式(A.5)の J と式(A.6)の H についてはともに式(A.3),(A.4)の漸近形を用いて良い。すると、結局は

$$\psi(r_c) = 2qr_c - \frac{\mu}{k_F r_c \sin \alpha} \quad (\text{A.11})$$

の条件を得る。式(A.10)を部分積分すると

$$\psi(r_c) = - \frac{\mu}{k_F r_c \sin \alpha} + 2qr_c - 2 \int_0^\infty dr' e^{-2K(r')} \left(q - \frac{\mu \Delta(r')}{k_F r' \sin^2 \alpha} \right) \quad (\text{A.12})$$

となるので、これを式(A.11)に代入すると、固有値として

$$\epsilon = \frac{\mu}{k_F \sin \alpha} g(\alpha), \quad g(\alpha) = \frac{\int_0^\infty \frac{\Delta(r)}{r} e^{-2K(r)} dr}{\int_0^\infty e^{-2K(r)} dr} \quad (\text{A.13})$$

を得る。ここで無次元の関数 $g(\alpha)$ は常に 1 に近い値となることが数値計算などにより確かめられている。式 (A.13) での固有値の表式は無次元化された形で書いているのでこれを元に戻す。このため、 $\epsilon \rightarrow \epsilon/\Delta_0$, $k_F^{-1} \rightarrow (k_F \xi_0)^{-1} = \Delta_0/E_F$ の変換を行なう。すると、固有エネルギーの表式として式 (4.6) が得られる。

参考文献

- [1] M. Ichioka, N. Hayashi, N. Enomoto, K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995), 12 月号に掲載予定.
M. Ichioka, N. Enomoto, N. Hayashi, K. Machida, Phys. Rev. B, 掲載予定.
N. Schopohl and K. Maki, Phys. Rev. B **52**, 490 (1995).
- [2] B. Keimer, W. Y. Shih, R. W. Erwin, J. W. Lynn, F. Dogan, and I. A. Aksay, Phys. Rev. Lett. **73**, 3459 (1994).
I. Maggio-Aprile, Ch. Renner, A. Erb, E. Walker, and Ø. Fischer, Phys. Rev. Lett. **75**, 2754 (1995).
- [3] L. N. Bulaevskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **64**, 2241 (1973). [Sov. Phys. -JETP **37**, 1133 (1973).]
- [4] R. A. Klemm, A. Luther and M. R. Beasley, Phys. Rev. B **12**, 877 (1975).
- [5] L. N. Bulaevskii, M. Ledvij, and V. G. Kogan, Phys. Rev. B **46**, 366 (1992).
D. Feinberg, Physica C **194**, 126 (1992).
- [6] C. Caroli, P. G. de Gennes and J. Matricon, Phys. Lett. **9**, 307 (1964).
C. Caroli and J. Matricon, Phys. Kondens. Materie **3**, 380 (1965).
- [7] H. F. Hess, R. B. Robinson, R. C. Dynes, J. M. Valles, Jr. and J. V. Waszczak, Phys. Rev. Lett. **62**, 214 (1989).
H. F. Hess, R. B. Robinson and J. V. Waszczak, Phys. Rev. Lett. **64**, 2711 (1990); Physica (Amsterdam) **169B**, 422 (1991).
- [8] M. Ichioka and T. Tsuneto, J. of Low Temp. Phys., **96**, 213 (1994).
- [9] M. Ichioka, Phys. Rev. B **51**, 9423 (1995).
- [10] L. Bulaevskii and J. R. Clem, Phys. Rev. B **44**, 10234 (1991).
- [11] M. Oussena, P. A. J. de Groot, R. Gagnon and L. Taillefer, Phys. Rev. Lett. **72**, 3606 (1994).

- 12] V. G. Kogan, Phys. Lett. 85A, 298 (1981).
- 13] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Benjamin, New York, 1966), p. 71.
- 14] J. D. Shore, M. Huang, A. T. Dorsey and J. P. Sethna, Phys. Rev. Lett. 62, 3089 (1989).
- 15] F. Gygi and M. Schluter, Phys. Rev. B41, 822 (1990); Phys. Rev. Lett. 65, 1820 (1990); Phys. Rev. B43, 7609 (1991).
- 16] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Benjamin, New York, 1966), p.156.
- 17] Ch. Bruder, Phys. Rev. B41, 4017 (1990).
- 18] U. Klein, J. Low Temp. Phys. 69, 1 (1987).
 U. Klein, Phys. Rev. B40, 6601 (1989).
 U. Klein, Phys. Rev. B41, 4819 (1990).
 U. Klein, Phys. Rev. Lett. 70, 2806 (1993).
- 19] M. R. Norman, A. H. MacDonald, and H. Akera, Phys. Rev. B51, 5927 (1995).
- 20] P. Miller, and L. Györfy, J. Phys. :Condens. Matter 7, 5579 (1995).
- 21] Y. Wang, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B52, R3876 (1995).